

Translationsenergie-Spektroskopie elektronischer Wechselwirkungen bei streifender Streuung schneller Atome an Festkörperoberflächen

D I S S E R T A T I O N

zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)

im Fach Physik

eingereicht an der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I
der Humboldt-Universität zu Berlin

von

Herr Dipl.-Phys. Sven Lederer
geboren am 14.09.1976 in Neubrandenburg

Präsident der Humboldt-Universität zu Berlin
Prof. Dr. Christoph Marksches

Dekan der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I
Prof. Thomas Buckhout, PhD

Gutachter/innen: 1. Prof. Dr. Helmut Winter
2. Prof. Hannspeter Winter
3. Prof. Dr. Recardo Manzke

Tag der mündlichen Prüfung: 25. Juli 2006

Abstract

The kinetic electron emission (KE) in coincidence with the energy loss of noble gas atoms impinging on metal surfaces under grazing angles of incidence is studied. Results for scattering of helium, neon, and argon atoms from Al(111), Al(110), and Cu(111) are presented and discussed. In the first chapters the experimental technique of grazing scattering, the experimental setup, and a geometric and electronic characterization of the surfaces is described. General aspects of projectile energy loss and KE for grazing scattering of helium atoms are discussed. It is shown that the threshold behavior of the KE can be interpreted in terms of a simple model of binary-encounter between projectiles and valence electrons. From threshold velocities for KE electron momenta and potentials in front of the studied metal surfaces are derived. Then special features for the grazing scattering of neon and argon are discussed. For neon impinging on Al(111) with energies normal to the surface above 25 eV electron promotion was found to dominate the electron emission process. Sub-threshold KE for scattering of neon and argon atoms is interpreted by two models. The first one is based on the local electron momentum distribution in front of the surface. The second one involves correlated excitation of two conduction electrons well above the Fermi level with subsequent emission of an electron via Auger deexcitation. Furthermore an explanation for the different KE yields under axial and planar surface channeling conditions is provided.

Keywords:

atom scattering, metal surface, electron emission, energy loss

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird mit Hilfe der koinzidenten Messung des Energieverlusts gestreuter Projektile zusammen mit der Anzahl emittierter Elektronen pro Streuprozess die Wechselwirkung schneller Atome mit Metalloberflächen untersucht. Dabei wird insbesondere die streifende Streuung der Edelgasatome Helium, Neon und Argon an Al(110)-, Al(111)- und Cu(111)-Oberflächen betrachtet. In den ersten Kapiteln wird die Messmethode der streifenden Streuung, der verwendete experimentelle Aufbau sowie der Charakterisierung der untersuchten Metalloberflächen anhand ihrer geometrischen und elektronischen Eigenschaften erläutert. Nach einführenden Betrachtungen zu Energieverlust und Elektronenemission bei der streifenden Streuung von Heliumatomen erfolgt eine detaillierte Diskussion zum Schwellenverhalten der kinetischen Elektronenemission (KE). Dabei wird gezeigt, dass das Schwellenverhalten durch ein Modell basierend auf dem zentralen Stoß zwischen Projektil und Valenzelektronen beschrieben werden kann. Aus den Schwellengeschwindigkeiten werden Informationen über Elektronenimpulse und Elektronenpotentiale vor Metalloberflächen abgeleitet. Ferner wird die Streuung von Neon- und Argonatomen untersucht. Für das System Ne-Al(111) wird ab Senkrechterenergien von ca. 25 eV Elektronenpromotion beobachtet. KE unterhalb der klassischen Schwelle für die Streuung von Neon- und Argonatomen wird im Rahmen von zwei alternativen Modellen interpretiert: der Effekt der Impulsdichteverteilung der Elektronen vor der Oberfläche oder die gleichzeitige Anregung zweier benachbarter Elektronen mit anschließenden Auger-Zerfall. Abschließend die unterschiedlichen KE für axiales und planares Oberflächen-Channeling untersucht und interpretiert.

Schlagwörter:

Atomstreuung, Metalloberfläche, Elektronenemission, Energieverlust

Danksagung

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. H. Winter vom Lehrstuhl für „Physik der Grenzflächen und dünnen Schichten“ der Humboldt-Universität zu Berlin, der Initiator der Untersuchungen war und mich maßgeblich bei der Umsetzung und Auswertung der Experimente unterstützt hat. Er erst ermöglichte mir diese Dissertation.

Herrn Prof. HP Winter der Technischen Universität Wien gilt mein besonderer Dank für die zahlreichen Diskussionen und die stets enge Zusammenarbeit.

Bei Herrn Prof. Dr. F. Aumayr der Technischen Universität Wien möchte ich mich für die Bereitstellung des Elektronendetektors, der für die Durchführung der Experimente notwendig war, bedanken.

Ebenso danke ich Herrn Dr. A. Mertens für die Vielzahl von interessanten Diskussionen, kritischen Korrekturen und wertvollen inhaltlichen Hinweisen. Ihm möchte ich zusätzlich für die Ermutigung und den Beistand bei zahlreichen Schwierigkeiten danken.

Mein Dank für die Hilfe beim Aufbau und die ständigen Verbesserungen der Koinzidenzelektronik, die den Grundstein für diese Arbeit legte, geht an Herrn Dipl. Ing. K. Maass. Ich bin ihm vor allen Dingen für die Beratung bei den zahlreichen elektronischen Problemen und die schnelle Ausführung von Reparaturen, ohne die die Fortführung der Experimente nicht möglich gewesen wäre, dankbar.

Für die zahlreichen Diskussionen theoretischer Natur und die durchgeführten Simulationen danke ich Dr. Ch. Lemell von der Technischen Universität Wien.

Aber auch außerhalb meines Arbeitsumfeldes unterstützten mich zahlreiche Verwandte und Freunde bei dieser Dissertation und ermöglichten mir somit das notwendige soziale Umfeld.

Mein persönlicher Dank gilt dabei in erster Linie meinen Eltern, die mir das Studium der Physik ermöglichten und damit den Grundstein für diese Dissertation legten.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Streifende Streuung und Oberflächenpotentiale	3
2.1	Interatomare Potentiale	3
2.2	Streifende Streuung	4
2.3	Oberflächenpotentiale	7
3	Experiment	11
3.1	Ionenbeschleuniger und Streukammer	11
3.2	Projektilnachweis und TOF	13
3.3	Elektronennachweis	17
3.4	Koinzidenz	20
4	Charakterisierung der untersuchten Oberflächen	25
4.1	Geometrische Struktur und Präparation	25
4.2	Elektronische Struktur	27
5	Untersuchungen zur Streuung von Heliumatomen	31
5.1	Energieverlust bei der Streuung von Heliumatomen	32
5.2	Elektronenemission bei der Streuung von Heliumatomen	35
5.3	Schwellenverhalten der kinetischen Elektronenemission	41
5.3.1	Modell	42
5.3.2	Experimentelle Untersuchungen zum Schwellenverhalten der kinetischen Elektronenemission	47
5.3.3	Bestimmung von Fermi-Impulsen vor Metalloberflächen	55
6	Untersuchungen zur Streuung von Neon- und Argonatomen	61
6.1	Elektronenpromotion bei der Streuung von Neon	61
6.2	Compton-Profil und „heiße“ Elektronen	73
7	Azimutale Abhängigkeiten	101
8	Zusammenfassung	115
	Literaturverzeichnis	117

Abbildungsverzeichnis	123
Aktuelles Publikationsverzeichnis	129

Kapitel 1

Einleitung

In der Arbeitsgruppe „Physik der Grenzflächen und dünnen Schichten“ des Instituts für Physik der Humboldt-Universität zu Berlin wird die Physik von Oberflächen kristalliner Festkörper mit Methoden der streifenden Streuung von Ionen und Atomen untersucht.

Die experimentelle Methode der streifenden Streuung stellt hohe Anforderungen an die experimentellen Bedingungen. So sind erst durch den Einsatz von Ultra-Hochvakuum-Anlagen, Methoden zur Präparation atomar ebener Oberflächen sowie von energetisch und in der Ausbeute stabilen Ionenquellen definierte Experimente ermöglicht worden. Insbesondere die Qualität der zu untersuchenden Kristalloberflächen ist dabei von essentieller Bedeutung, da sich ein Projektil während der Streuung in Bereichen mit geringem Abstand zur Probe aufhält. Die Trajektorie der Projektile wird dabei durch die Primärenergie E_0 und den Einfallswinkel Φ_{in} festgelegt. Der Einfallswinkel beträgt in den Experimenten typischerweise einige Grad, sodass sich die Komponenten der Projektilenergie senkrecht (E_{\perp}) und parallel (E_{\parallel}) zur Oberfläche um ca. vier Größenordnungen unterscheiden.

$$E_{\parallel} = E_0 \cos^2 \Phi_{in} \approx E_0$$

$$E_{\perp} = E_0 \sin^2 \Phi_{in} \approx E_0 \Phi_{in}^2.$$

Durch die geringe Energie senkrecht zur Oberfläche wird die Streuung der Projektile in den Festkörper unterdrückt. Damit ist diese experimentelle Methode besonders sensitiv auf die oberste Atomlage und gestattet das Studium der physikalischen Eigenschaften der Oberfläche.

Durch die Oberflächensensitivität der streifenden Streuung können eine Vielzahl von physikalischen Eigenschaften untersucht werden. Beispiele sind Untersuchungen zum Oberflächenmagnetismus durch Einfang oder Emission spinpolarisierter Elektronen [1, 2, 3], zur Neutralisation und Ionisation von Projektilen aufgrund von kinematischen Effekten [4, 5, 6], zur „skipping motion“ [7, 8], zur Bildung negativer Ionen [9, 10, 11], zum Wachstum dünner Schichten [12, 13], Studien zum Energieverlust [14, 15, 16], zur Ioneninduzierten Emission von Elektronen [1, 17, 18],

Bildladungsuntersuchungen [19, 20] und die Untersuchung der Morphologie und Zusammensetzung [21] sowie der Topologie von Oberflächen.

Diese Arbeit bildet die Fortsetzung zu Studien zum Energieverlust und zur Elektronenemission bei der Streuung von Atomen an Isolator-Oberflächen, im Speziellen an Alkalihalogeniden. Durch den Einsatz koinzidenter Techniken konnte die kinetische Elektronenemission (KE) auf die Bildung negativer Projektionen zurückgeführt werden [22, 23, 24]. Dieser Mechanismus bildet die Grundlage für die im Vergleich zu Metallen sehr kleinen Schwellengeschwindigkeiten der KE. Aufbauend auf dem Verständnis des Schwellenverhaltens bei der Streuung atomarer Projektile an Oberflächen von Isolatoren wurden in der vorliegenden Arbeit der Energieverlust und die Elektronenemission koinzident bei der Streuung von Atomen im Grundzustand an einer Al(110)-, einer Al(111)- und einer Cu(111)-Oberfläche untersucht.

Neben dem grundlegenden Verständnis physikalischer Zusammenhänge sind der Energieverlust und die Elektronenemission von praktischer Bedeutung z.B. für Teilchen-Detektoren, Oberflächen-Analysen und das Plasma-Ätzen.

In den ersten Kapiteln werden die streifende Streuung und Oberflächenpotentiale erläutert, der verwendete experimentelle Aufbau beschrieben sowie die untersuchten Oberflächen charakterisiert. In dem sich anschließenden Themenkomplex wird die Streuung von Heliumatomen betrachtet. Dabei wird ein binäres Stoß-Modell zur Beschreibung des Schwellenverhaltens der kinetischen Elektronenemission erläutert und experimentell verifiziert. Anschließend wird auf die Besonderheiten in Elektronenemission und Energieverlust bei der Streuung von Neon- und Argonatomen eingegangen. Der letzte Abschnitt beschäftigt sich mit der Klärung des Phänomens der unterschiedlichen Elektronenausbeuten bei planarem und axialem Oberflächen-Channeling.

In dieser Arbeit werden, sofern nicht anders angegeben, atomare Einheiten (atomic units, a.u.) verwendet. Dieses Einheitensystem wird durch $\hbar = 1$, $4\pi\epsilon_0 = 1$ und $m_e = 1$ (Elektronenmasse) definiert. Zur Übersicht sind im Folgenden die Umrechnungen der wichtigsten Größen aufgezeigt.

Ladung	1 a.u. = $1,6021 \cdot 10^{-19}$ C
Masse	1 a.u. = $9,109 \cdot 10^{-31}$ kg
Energie	1 a.u. = 27,210eV = $4,35975 \cdot 10^{-18}$ J
Geschwindigkeit	1 a.u. = $2,1877 \cdot 10^6$ m/s
Länge	1 a.u. = $0,529 \cdot 10^{-10}$ m

Kapitel 2

Streifende Streuung und Oberflächenpotentiale

2.1 Interatomare Potentiale

Bei der Annäherung eines Projektils an die Oberfläche eines Festkörpers wirken im Allgemeinen die Abstoßung zwischen den Atomkernen der Oberfläche und des Projektils sowie das anziehende Bildladungspotential. In dieser Arbeit wird überwiegend die Streuung von Projektilen betrachtet, deren Ausgangs- und Endzustand atomar sind. Da die neutralen Projektile keinen Bildladungswechselwirkungen unterliegen, wird bei der Betrachtung der Oberflächenpotentiale der Bildladungsanteil unberücksichtigt gelassen.

Das Wechselwirkungspotential zwischen Atomen der Kernladungszahlen Z_1 und Z_2 kann analytisch über ein geschirmtes Coulomb-Potential beschrieben werden.

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (2.1)$$

Die Funktion $\Phi\left(\frac{r}{a}\right)$, die so genannte Abschirmfunktion, repräsentiert die Abschirmung des Coulomb-Potentials der Atomkerne durch die Elektronenverteilungen und wird häufig durch eine Summe von Exponentialfunktionen dargestellt.

$$\Phi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_i \alpha_i \exp\left[-\beta_i \frac{r}{a}\right] \quad (2.2)$$

Die Parameter α_i und β_i sind Konstanten, die unabhängig von den Kernladungszahlen der Stoßpartner sind und die Randbedingung $\sum \alpha_i = 1$ für den ungeschirmten Grenzfall $r \rightarrow 0$ erfüllen. Die Größe a ist die so genannte Abschirmlänge. Ziegler, Biersack und Littmark [25] zeigten eine gute Übereinstimmung von theoretischen und experimentellen Potentialen, wenn die Abschirmfunktion $\Phi\left(\frac{r}{a}\right)$ aus vier Summanden mit Konstanten, wie in Tabelle 2.1 dargestellt, und einer Abschirmlänge $a = a_u$ gebildet wird.

$$a_u = \frac{0,8854}{Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23}} \quad (2.3)$$

i	α	β
1	0,1818	3,2
2	0,5099	0,9423
3	0,2802	0,4028
4	0,02817	0,2016

Tabelle 2.1: Konstanten für das ZBL-Potential

Aufgrund der guten Übereinstimmung mit einer großen Zahl von zufälligen $Z_1 - Z_2$ Kombinationen wird das ZBL-Potential auch „universelles“ Potential genannt.

Aktuelle Untersuchungen der Potentiale zeigen jedoch, dass das ZBL-Potential in großen Abständen von der Oberfläche zu stark ist. Einen ähnlichen Ansatz für die Abschirmfunktion lieferte Moliere [26]. Er schlug statt der vier Summanden des ZBL-Potentials eine Summe von drei Exponentialfunktionen vor. Die Konstanten des Moliere-Potentials sind in Tabelle 2.2 zusammengefasst. Als Abschirmlänge wurde dabei die Firsovsche Abschirmlänge [27] a_F nach dem Thomas-Fermi-Atommodell zugrunde gelegt.

$$a_F = \frac{0,8854}{\left(\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2}\right)^{2/3}} \quad (2.4)$$

i	α	β
1	0,35	0,3
2	0,55	1,2
3	0,1	6

Tabelle 2.2: Konstanten für das Moliere-Potential

O'Connor und Biersack [28] verfeinerten das Moliere-Potential durch Anpassung der Firsovschen Abschirmlänge, wie in Gleichung 2.5 dargestellt.

$$a_c = \left[0,045 \left(\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2}\right) + 0,54\right] \cdot a_F \quad (2.5)$$

2.2 Streifende Streuung

Betrachtet man die Streuung eines Projektils an einem einzelnen Atom, fällt für die Trajektorien besonders ein Punkt auf. Mit kleiner werdendem Stoßparameter steigt der Streuwinkel. Dieser Effekt hat die Ausbildung eines Kegels hinter dem Targetatom zur Folge, in den die Projektile nie eindringen können. Dieser Bereich wird „shadow cone“ genannt. Findet die Streuung nun nicht an einem einzelnen Atom sondern einer Kette von Atomen statt, kommt es bei jedem Streupartner zur Ausbildung des „shadow cones“. Verringert man den Einfallswinkel des Projektils zur Oberfläche überlappen diese Kegel. Je flacher der Einfallswinkel, desto

höher ist der Grad der Überlappung. Im Regime der streifenden Streuung ist diese Überlappung nun so groß, dass die „shadow cones“ eine ebene Fläche bilden. Die Streuung der Projektile vollzieht sich nicht mehr durch Stöße mit großen Streuwinkelverteilungen, sondern durch eine Folge von Einzelstößen mit einer schmalen und definierten Winkelverteilung.

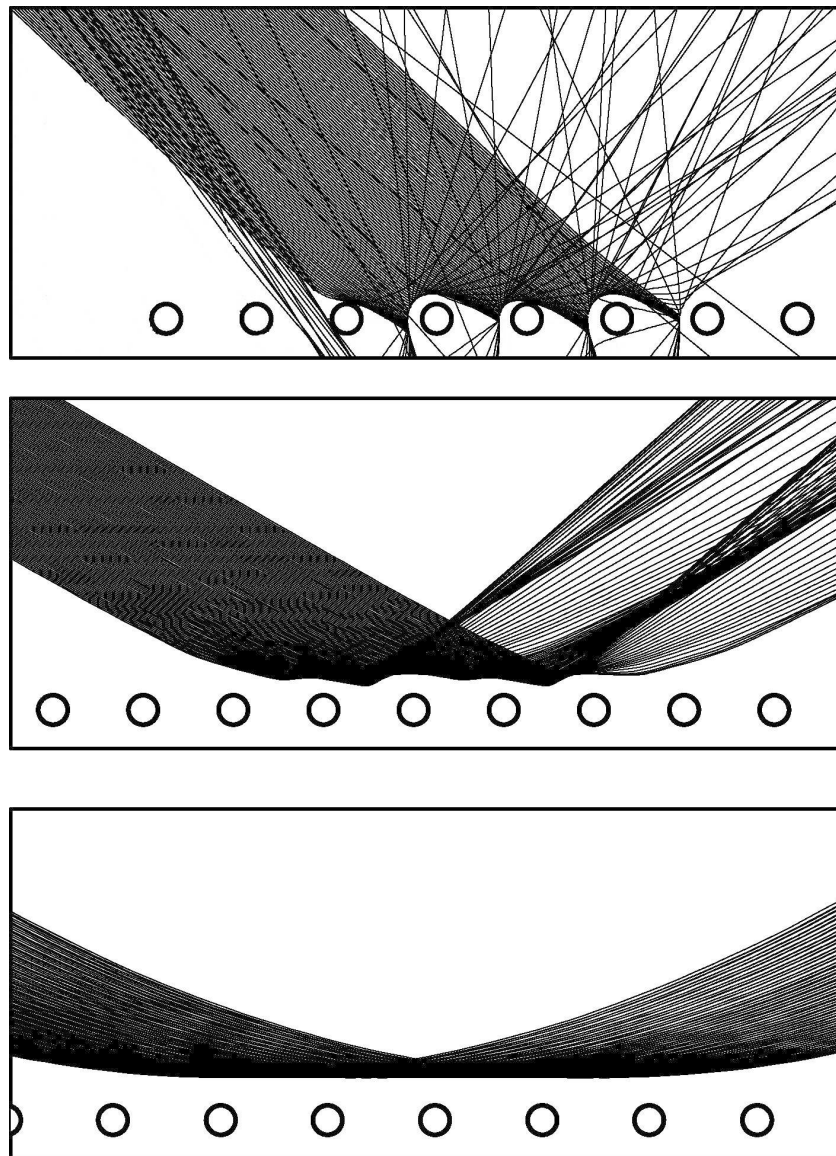


Abbildung 2.1: Trajektorien zur Demonstration der streifenden Streuung

In Abbildung 2.1 ist dieses Konzept anhand von Trajektorien skizziert. Im oberen Bild der Abbildung ist der Einfallswinkel so groß, dass die „shadow cones“ nicht einmal das nächste Atom der obersten Atomlage überlappen. Daraus resultiert eine große Verteilung von Streuwinkeln und sogar das Eindringen der Projektile in den Festkörper. Im Mittelteil von Abbildung 2.1 ist der Einfallswinkel geringer. Die Kegel überdecken die nächsten Nachbarn und die Winkelverteilung wird kleiner.

Das Regime der streifenden Streuung wird durch die untere Grafik repräsentiert. Die „shadow cones“ liegen aufgrund des sehr flachen Einfallswinkels fast in einer Ebene parallel zur obersten Atomlage. Die Trajektorien (bzw. Streuwinkel) der Projektile sind unabhängig vom Ort der Streuung auf der Oberfläche. Der Ausfallswinkel ist gleich dem Einfallswinkel, und alle Projektile kommen gleich nahe an die Oberfläche heran. Damit ergeben sich der streifenden Streuung definierte Trajektorien.

Ein weiterer Vorteil der streifenden Streuung liegt in der Modellierung des Oberflächenpotentials. Für die normale Beschreibung der Oberfläche ist die Aufsummierung sämtlicher Einzelpotentiale zwischen dem Projektil und den einzelnen Targetatomen notwendig.

$$U(r) = \left\langle \sum_{OF-Atome} V(r) \right\rangle \quad (2.6)$$

In der Geometrie der streifenden Streuung kommt es zur Ausbildung von ebenen Äquipotentialflächen vor der Oberfläche. Das Potential zwischen dem Projektil und der Oberfläche hängt nur noch vom Abstand zur Oberfläche ab. Diese Entkopplung der Senkrechtkomponente (z) führt bei Verwendung von Zylinderkoordinaten zu dem Potential in (2.7)

$$U(r) \approx 2\pi n_s \int_0^\infty dr r V(\sqrt{r^2 + z^2}) \quad (2.7)$$

mit n_s als Oberflächenteilchendichte. Setzt man für $V(r)$ Gl. 2.1 und Gl. 2.2 ein, erhält man ein planares Oberflächenpotential U_p .

$$U_p(z) = 2\pi_s Z_1 Z_2 a \sum_i \frac{\alpha_i}{\beta_i} \exp\left[-\beta_i \frac{z}{a}\right] \quad (2.8)$$

Da das Potential nur auf die Energiekomponente senkrecht zur Oberfläche wirkt, lässt sich die Gesamtenergie E_0 eines Projektils in einen parallelen und einen senkrechten Anteil separieren,

$$E_0 = \frac{p_{\parallel}^2}{2M} + \frac{p_{\perp}^2}{2M} + U_p(z) \quad (2.9)$$

wobei M die Projektilmasse und p der Projektilimpuls sind.

Der Grenzfall für die streifende Streuung tritt auf, wenn die Stöße zwischen Projektil und Target in Großwinkelstreuung enden. Es zeigt sich, dass thermische Auslenkungen der Oberflächenatome die Hauptursache für solche Stöße mit kleinem Stoßparameter sind [29]. Da bei Raumtemperatur die mittlere quadratische Auslenkung der Oberflächenatome etwa der Abschirmlänge entspricht, lässt sich eine kritische Senkrechterenergie E_c definieren, ab der das planare Oberflächen-Channeling zusammenbricht.

$$E_c \approx 2\pi a n_s Z_1 Z_2 \quad (2.10)$$

2.3 Oberflächenpotentiale

In Arbeiten zur Regenbogenstreuung an Metalloberflächen wurde gezeigt, dass die klassischen Potentiale, wie sie in Kapitel 2.2 erläutert wurden, keine ausreichende Übereinstimmung mit experimentellen Daten liefern [30, 31]. Bei diesen Messungen wurde der Ablenkwinkel aus der Streuebene (Regenbogenwinkel) infolge der Streuung entlang niedrig indizierter Kristallrichtungen untersucht. Unter Verwendung neutraler Projektile hängt dieser Winkel einzig vom Wechselwirkungspotential ab. Durch Simulation der Trajektorien können damit Rückschlüsse auf das Potential geschlossen werden. Die Ursache für die Abweichungen zwischen Experiment und Simulation mit klassischen Potentialen wird auf die Existenz eines zusätzlichen Potentials vor der Oberfläche zurückgeführt. Die Grundlage dieses Potentials ist die Einbettung des neutralen Projektilatoms in das Elektronengas vor der Oberfläche [32, 33]. Durch diese Einbettung verändert sich die Elektronendichte und das elektrostatische Potential des Elektronengases [34]. Die für die Einbettung aufzuwendende Energie wird durch die so genannte „cohesive function“ beschrieben [34]. Diese Funktion wird nach Puska [35] für die Edelgase He, Ne und Ar als Polynom dritter Ordnung dargestellt,

$$E_{coh}(n) = E_1 n + E_2 n^2 + E_3 n^3 \quad (2.11)$$

wobei n die Elektronendichte repräsentiert und die Parameter E_1, E_2 sowie E_3 elementspezifische Konstanten sind [35].

Für die Untersuchungen zum Energieverlust und der Elektronenemission im Regime der streifenden Streuung spielt die Kenntnis der Trajektorie eine entscheidende Rolle. Daher wurden im Rahmen dieser Arbeit Potentiale verwendet, deren Bestimmung im Folgenden kurz erläutert wird. Als Grundlage eines Wechselwirkungspotentials, welches die Daten aus [30] wiedergibt, wurde die Abschirmfunktion nach O'Connor und Biersack [28] verwendet und durch einen Parameter a_{korr} modifiziert.

$$a = a_{korr} 0,8854 \left(\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2} \right)^{-\frac{2}{3}} \left(0,045 \left(\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2} \right) + 0,54 \right) \quad (2.12)$$

Zur Beschreibung der Elektronendichte in Gleichung 2.11 wird ein analytischer Ausdruck für die Metalloberflächen verwendet [36],

$$n(z) = n_0 \left[\left(1 - \frac{1}{2} \exp[\beta(z - z_j)] \right) \Theta(z_j - z) + \frac{1}{2} \exp[-\beta(z - z_j)] \Theta(z - z_j) \right] \quad (2.13)$$

wobei z der Abstand zur Oberfläche, $\Theta(z)$ die Heaviside'sche Stufenfunktion, n_0 die Elektronendichte im Volumen des Festkörpers und β sowie z_j zur Anpassung des Potentials dienende Parameter sind.

Das gesamte planare Oberflächenpotential resultiert aus der Summe von Gleichung 2.8 und Gleichung 2.11 zu

$$U_{ges} = E_{coh} + U_p \quad (2.14)$$

Für die Simulation der Regenbögen ist das planare Potential U_P aufgrund der veränderten Symmetrie entlang niedrig indizierter Kristallrichtungen allerdings ungeeignet. Im Regime der streifenden Streuung ergibt sich entlang der Atomreihen eine zylindrische Symmetrie. Das Potential kann in diesem Fall durch Gleichung 2.15 beschrieben werden,

$$U_{zyl} = 2 \frac{Z_1 Z_2}{d} \sum_i \alpha_i K_0 \left(\beta_i \frac{r}{a} \right) \quad (2.15)$$

wobei K_0 die Besselfunktion 0-ter Ordnung, d die Distanz zwischen den Atomen in der Kristallrichtung und r der Abstand des Projektils von einer Atomreihe sind. Mit Hilfe von $E_{coh} + U_{zyl}$ können nun die Parameter a_{korrr} , β und z_j bestimmt und für das planare Potential in Gleichung 2.14 verwendet werden.

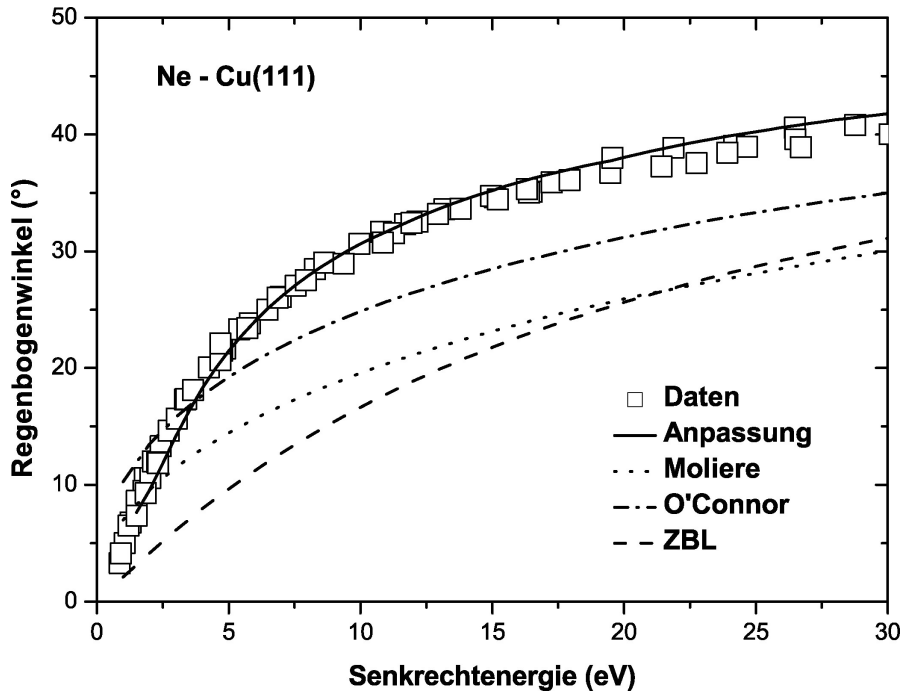


Abbildung 2.2: Simulierte und experimentelle Regenbogenwinkel für die Streuung von Ne^0 an $\text{Cu}(111)$ als Funktion der Senkrechtenergie; offene Quadrate: experimentelle Daten nach [30], Linien: Simulationen

In Abbildung 2.2 ist exemplarisch für die Systeme Ne-, Ar-Al(111) und Ne-Cu(111) das Ergebnis der Simulation mit Hilfe des angepassten Potentials, des ZBL-, des Moliere- sowie des O'Connor-Biersack-Potentials für die Streuung von Ne^0 an Cu(111) entlang der $\langle 110 \rangle$ -Richtung zusammen mit den experimentellen Regenbogenwinkeln nach [30] dargestellt. Die Abbildung zeigt, dass die Simulationen unter Verwendung klassischer Potentiale die Meßdaten nicht reproduzieren. Unter Berücksichtigung und Anpassung der „cohesive function“ wird eine gute Übereinstimmung erzielt. Die Parameter der auf diese Weise bestimmten Wechselwirkungspotentiale für die Edelgase Neon und Argon mit der Al(111)- und der Cu(111)-Oberfläche sind in Tabelle 2.3 zusammengefaßt.

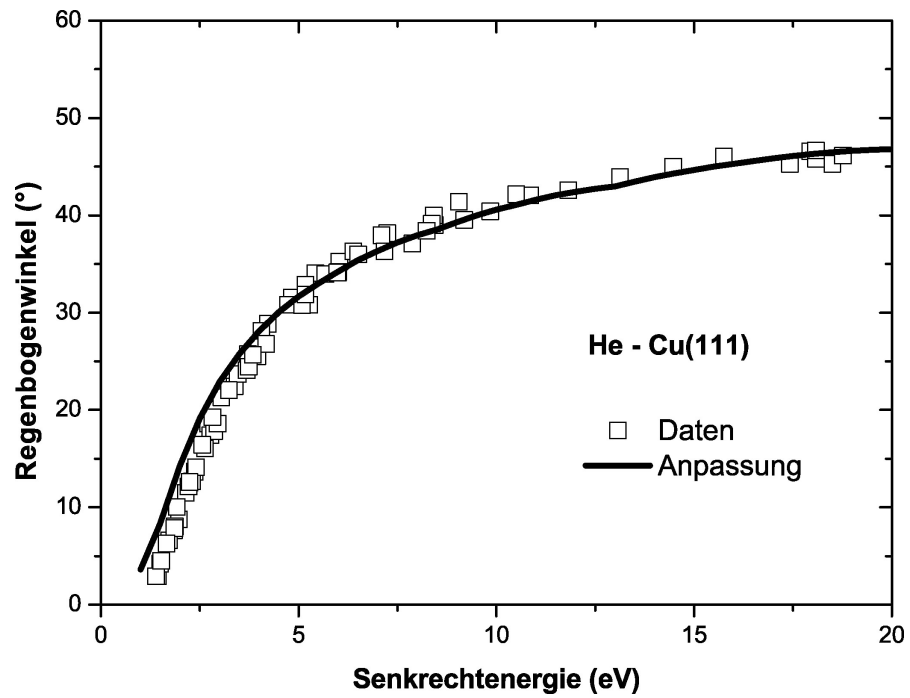


Abbildung 2.3: Experimentelle Regenbogenwinkel nach [30] und simulierte Regenbogenwinkel basierend auf dem angepassten Potential für das System He-Cu(111) (Details siehe Text)

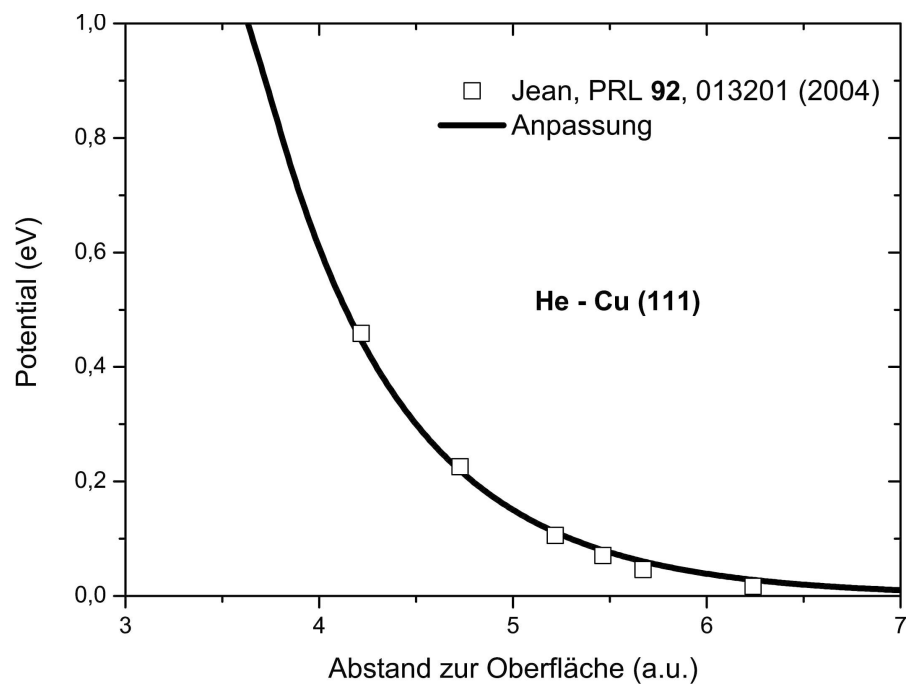


Abbildung 2.4: Von Jean et al. [37] berechnetes Potential und angepasstes Potential für das System He-Cu(111) (Details siehe Text)

Jean et al. [37] berechneten mit Hilfe der Dichte-Funktional-Theorie im Abstand von 2.0 a.u bis ca. 4.5 a.u. die Potentiale der Systeme He-Al(111) und He-Cu(111). Aufgrund dieser Daten wurden an die zu bestimmenden Helium-Potentiale zwei Bedingungen gestellt. Zum einen sollen die experimentellen Regenbogenwinkel und zum Zweiten die theoretischen Potentiale nach [37] wiedergegeben werden. In Abbildung 2.3 sind analog zu Abbildung 2.2 die experimentell bestimmten und die aus der Potentialanpassung gewonnenen Regenbogenwinkel dargestellt. Abbildung 2.4 zeigt das angepaßte planare Oberflächenpotential zusammen mit den Rechnungen aus [37]. Beide Grafiken beziehen sich auf das System He-Cu(111). Die Parameter für die Helium-Potentiale sind in Tabelle 2.3 zusammengefaßt.

	a_{korr}	β	z_j
He-Al(111)	0,85	1,4	3,4
Ne-Al(111)	0,84	0,55	3,5
Ar-Al(111)	0,85	0,4	3,2
He-Cu(111)	0,8325	1,3	3,8
Ne-Cu(111)	0,85	1,7	3,8

Tabelle 2.3: Parameter der Wechselwirkungspotentiale

Kapitel 3

Experiment

3.1 Ionenbeschleuniger und Streukammer

Dem Lehrstuhl „Physik der Grenzflächen und dünnen Schichten“ des Instituts für Physik der Humboldt-Universität zu Berlin steht ein 350-kV-Ionenbeschleuniger zur Erzeugung schneller Ionen zur Verfügung. Unter Verwendung dieses Beschleunigers werden die Ionen auf die Energie E_0 beschleunigt, massenselektiert und anschließend isotopenrein über einen Schaltmagneten in die Beamline zur Streukammer eingelenkt. Aufgrund der ionenoptischen Eigenschaften dieses Systems können Ionenströme ausreichender Intensität und Energieschärfe nur bis zu einer minimalen Energie von ca. 30 keV produziert werden.

Zur Untersuchung der Schwelle der kinetischen Elektronenemission, bei der Projektilenergien $E_0 \leq 10$ keV notwendig sind, wurde aus oben genannten Gründen ein zusätzlicher Kleinbeschleuniger verwendet, dessen massenselektierter und beschleunigter Ionenstrahl über ein zusätzliches Magnetfeld in die Beamline zur Streukammer eingespeist wird. Mit diesem System können Ionen mit Energien von ca. 100 eV bis 30 keV erzeugt werden. Der gesamt zugängliche Energiebereich der Projektile beträgt somit 100 eV bis 350 keV. Zur Erzeugung der Ionen im 30-kV-Beschleuniger dient eine Hohlkathoden-Gasentladungsquelle (SO 55) der Firma „High Voltage“. Durch die Verwendung eines Hochspannungsnetzgerätes der Firma „FuG“ (HCN 140-35000) und geeigneter Blenden in der UHV-Streukammer ermöglicht dieses System Energieschärfen von $\Delta E/E \leq 1 \cdot 10^{-3}$.

Der isotopenreine Ionenstrahl gelangt durch ein Blendenpaar bestehend aus einer horizontalen und einer vertikalen Blende (jeweils 0,25 mm Spaltbreite) in die in Abbildung 3.1 dargestellte Ultra-Hochvakuum(UHV)-Streukammer. Durch ein weiteres Paar solcher Blenden direkt vor dem Target wird eine Divergenz des Projektilstrahls von $0,02^\circ$ erreicht.

Die für die Flugzeitmessung erforderliche Erzeugung von Teilchenpaketen, bestehend aus möglichst einem einzelnen Projektil, erfolgt durch einen Spannungspuls, der an ein Plattenpaar angelegt wird, das sich unmittelbar hinter den ersten Blen-

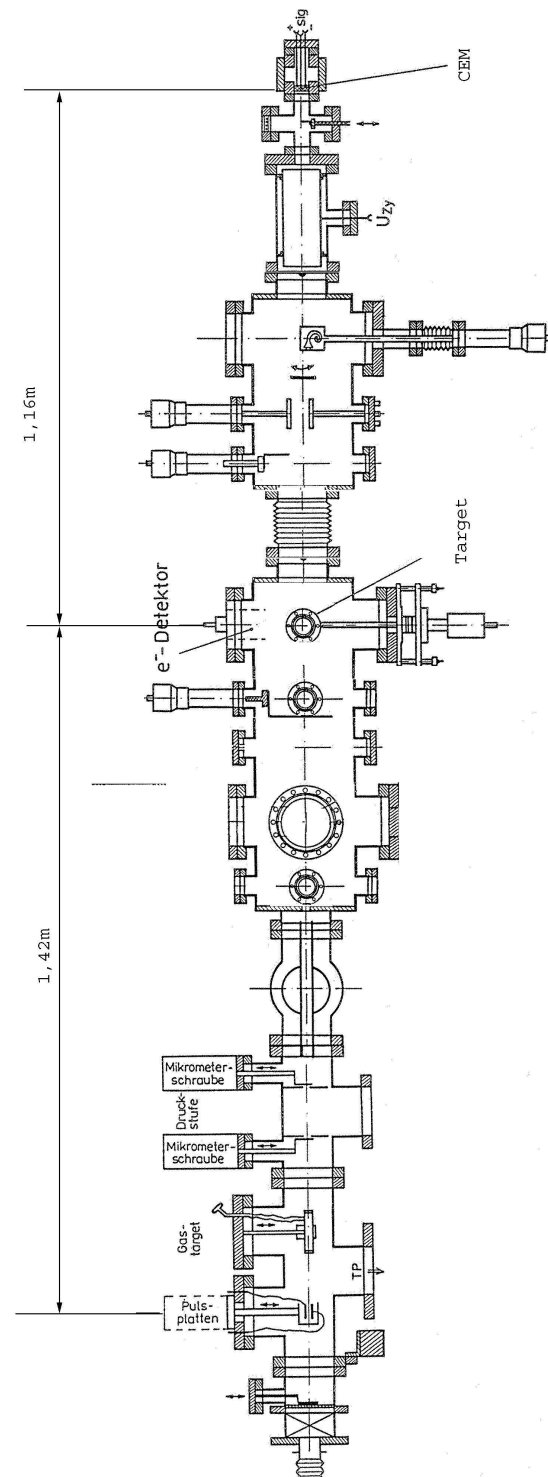


Abbildung 3.1: UHV-Streukammer

den befindet (Details siehe Kapitel 3.2). Da die Messungen zu dieser Arbeit vornehmlich mit neutralen Projektilen durchgeführt wurden, durchfliegen die Ionen ein Gastarget, welches aus einem 90 mm langen Zylinder besteht (Innendurchmesser 19 mm). Damit das Gastarget mit Drücken im Bereich von 10^{-3} mbar betrieben werden kann, ohne den Basisdruck der UHV-Streukammer (ca. 5×10^{-11} mbar) zu verschlechtern, wird der Zylinder mit Spalten der Dimension 2×4 mm abgeschlossen und das Gastarget durch eine sich anschließende differentielle Pumpstufe von der eigentlichen UHV-Streukammer getrennt.

Um die energetischen Eigenschaften des Projektilstrahls bei der Neutralisation nicht zu beeinflussen, ist eine quasisonante Neutralisation notwendig. Aus diesem Grund werden die verwendeten Edelgasionen in einem Gas des gleichen Elementes neutralisiert. So konnte für alle Projektile eine Neutralisationsrate von ca. 10 % erzielt werden. Die überlebenden Ionen werden durch eine Spannung an einem weiteren Plattenpaar so ausgelenkt, dass ausschließlich neutrale Projektile das Target erreichen. Nach Durchlaufen des letzten Blendenpaares kommt es zum Streuprozess an der Targetoberfläche.

Das Target ist auf einem Manipulator montiert, der eine azimutale Drehung um 360° erlaubt. Zwei Mikrometerschrauben legen die Strahlebene und den Einfallswinkel fest. Durch die Drehung des gesamten Targethalters, mit dem Target als Drehpunkt, wird sichergestellt, dass bei der Einstellung des Einfallswinkels die Position des Targets in der Strahlachse konstant bleibt. Dadurch entfällt eine Korrektur der Flugstrecken bei unterschiedlichen Einfallswinkeln. Eine unter dem Target angebrachte Heizung mit Thermoelement ermöglicht eine präzise Einstellung der Targettemperatur.

3.2 Projektilnachweis und TOF

Die an der Oberfläche gestreuten Projektile werden in 1,16 m Entfernung vom Target mit einem „Channelplate Electron Multiplier“ (CEM) der Firma „Roentdek“ nachgewiesen. Der Öffnungswinkel des CEM beträgt $0,8^\circ$.

Die Bestimmung der Energie neutraler Teilchen ist mit einem herkömmlichen Energieanalysator nicht möglich. Aus diesem Grund wird die Projektilenergie in den Untersuchungen dieser Arbeit über die Flugzeit der Projektile bestimmt. Um die Flugzeit der Projektile genau ermitteln zu können, ist es notwendig zeitlich definierte Teilchenpakete zu verwenden. Die Erzeugung dieser Teilchenpakete erfolgt durch einen Spannungspuls an einem Plattenpaar. Eine der beiden Platten ist geerdet, an der anderen liegt permanent eine positive Spannung an. Zur Erzeugung des Teilchenpaketes wird die Polarität der Spannung kurzzeitig umgekehrt. Durch den verwendeten Pulsgenerator sind die Zeiten zwischen dem Wechsel der Polarität der Spannung so klein, dass ein nahezu rechteckiger Spannungspuls entsteht. Die Auslenkung der Ionen durch diesen Spannungspuls hängt von ihrem zeitlichen Eintritt in das Plattenpaar ab. Zur Verdeutlichung sind in Abbildung 3.2 (links) die auf Ionen unterschiedlicher Eintrittszeit wirkenden Feldstärken skizziert. Die

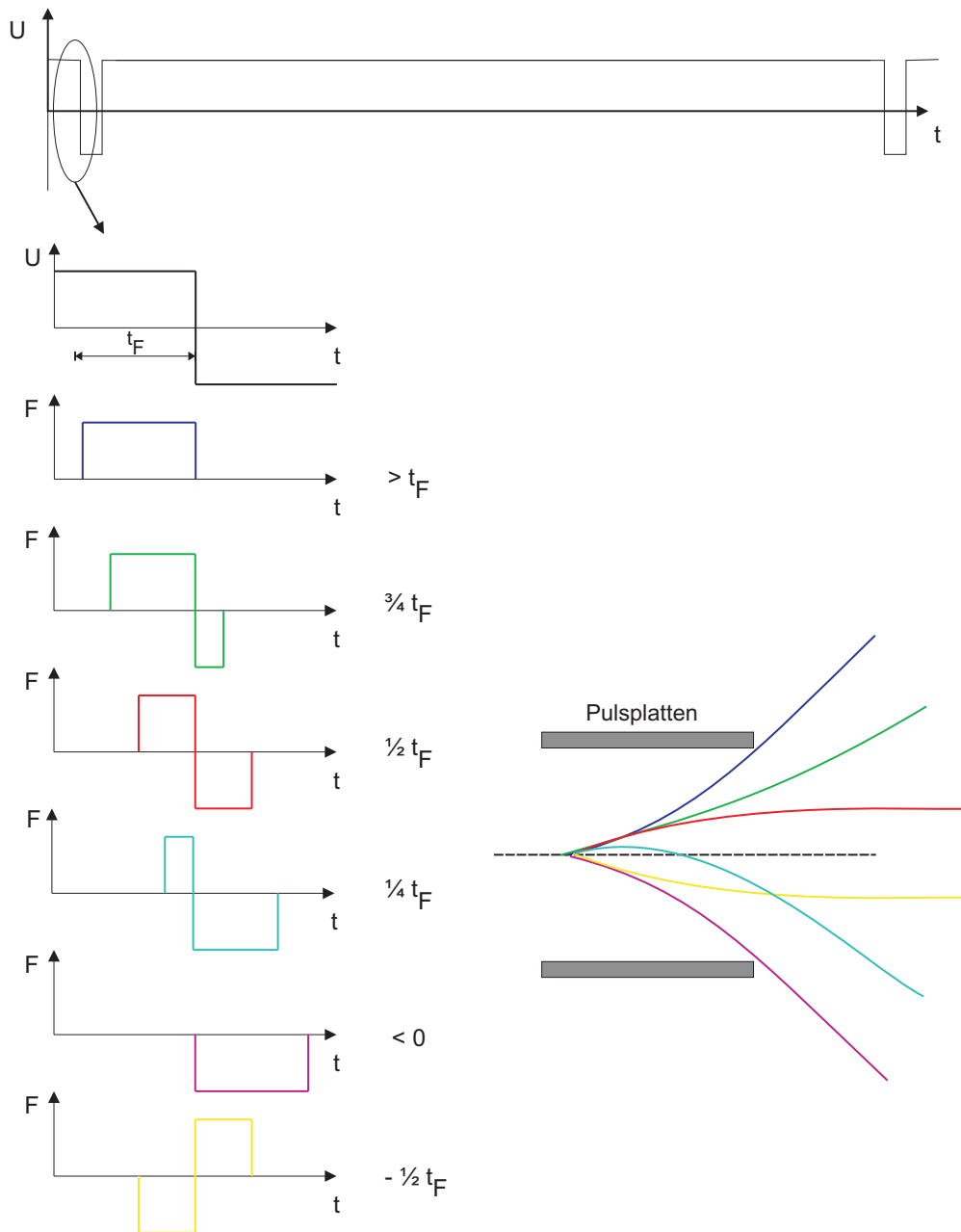


Abbildung 3.2: Feldstärken bei zeitlich verschiedenen Eintrittspunkten von Ionen in das Pulsplattenpaar und entsprechende Trajektorien

Referenzzeit t_F entspricht dabei der gesamten Flugzeit durch das Plattenpaar. Die Auswirkung auf die Bahn der Ionen ist auf der rechten Seite der Abbildung skizziert. Wie Abbildung 3.2 zu entnehmen ist, werden Ionen die $\frac{1}{2}t_F$ bzw. $-\frac{1}{2}t_F$ vor dem Spannungspuls in das Plattenpaar eintreten, parallel zur ihrer ursprünglichen Bahn verschoben. Dieser Versatz ermöglicht die Trennung der bei der Messung verwendeten Projektile von schon vorher neutralen Teilchen, die nicht vom Spannungspuls beeinflusst werden. Durch die geeignete Positionierung der nachfolgenden

Blenden wird erreicht, dass nur die Projektile mit der Eintrittszeit $\frac{1}{2}t_F$ das Target erreichen und alle anderen abgeschirmt werden. Das optimale Verhältnis von Pulsspannung zu Projektilenergie resultiert im verwendeten Aufbau zu ± 5 V pro keV. Bei geringerer Spannung ist die Trennung vom störenden Neutralanteil nicht mehr gewährleistet, und bei höheren Spannungen kann es zu Reflexionen innerhalb der Pulsplatten kommen. Die Anstiegszeiten der Spannungen liegen dabei im ns-Bereich.

Aufgrund der begrenzten Zeitauflösung des CEM und der Forderung an das Experiment, Elektronenzahlen entsprechenden Energieverlusten zuzuordnen, ist es notwendig, dass in einem Puls nur ein Projektil enthalten ist. Dies ist aufgrund der begrenzten Pulsfrequenz nicht gewährleistet. Unter der Voraussetzung, dass die am CEM auftreffenden Projektile einer Poissonverteilung ($P(k) = A^k/k! \cdot \exp[-A]$) gehorchen, resultiert folgender linearer Zusammenhang für das Verhältnis aus Zwei- und Ein-Teilchen-Prozessen ($k=2$ bzw. 1).

$$\frac{P(k=2)}{P(k=1)} = 0.5 A \quad (3.1)$$

Dabei ist A der Quotient aus den pro Sekunde nachgewiesenen Projektilen und der Pulsfrequenz. Je höher also die Pulsfrequenz ist, desto geringer ist die Wahrscheinlichkeit, zwei oder mehr Teilchen in einem Puls zu haben. Durch die verwendete Elektronik und die zu schaltenden Spannungen ist die Pulsfrequenz auf maximal 50 kHz begrenzt. Neben dieser technischen Beschränkung ist die Pulsfrequenz der Projektilenergie/-geschwindigkeit anzupassen. Für die korrekte Bestimmung der Flugzeit muß gewährleistet sein, dass die Periodenlänge der Pulsung (Zeit zwischen zwei aufeinanderfolgenden Pulsen) größer als die gesamte Flugzeit der Projektile ist. Dementsprechend sinkt die Pulsfrequenz mit geringer werdender Projektilenergie. Unter diesen Voraussetzungen und Berücksichtigung von Gleichung 3.1 wurden die Experimente bei Strahlintensitäten von ca. 1000 - 2000 Ereignissen pro Sekunde im direkten (nicht gestreuten) Strahl durchgeführt.

Im verwendeten „time of flight“ (TOF-) Aufbau dient das Signal eines am CEM nachgewiesenen Projektils als Startpuls für einen „Time to Amplitude Converter 567“ (TAC) der Firma „Ortec“. Das Stoppzeichen für den TAC liefert das durch einen „Gate and Delay Generator 416A“ (Firma „Ortec“) zeitlich verzögerte Signal des Pulsgebers. Durch die zeitliche Verzögerung wird erreicht, dass nicht die gesamte Flugzeit gemessen wird, sondern die Zeitdifferenz zum Referenzsignal, welches durch die theoretische Flugzeit des Projektils vom Pulser zum CEM gegeben ist. Diese Differenzmessung führt zu einer Erhöhung der Zeitauflösung. Das Ausgangssignal des TAC wird in einen „Analog To Digital Converter ND582“ (ADC) eingespeist und kann dann mit Hilfe eines Computers aufgezeichnet werden. In Abbildung 3.3 sind die Flugzeitspektren der direkten Strahlen für 12 keV He^+ und 12 keV He^0 dargestellt. Die volle Halbwertsbreite (FWHM) des Ionenstrahls beträgt 1,73 ns und die des Atomstrahls 2,02 ns. Bei einer Gesamtflugstrecke von 2,59 m vom Pulser zum CEM entsprechen diese Zeiten energetischen Breiten von 12,1 eV für He^+ bzw. 14,2 eV für He^0 . Abbildung 3.3 sind zwei wichtige Aspekte zu

entnehmen. Zum einen wird durch die Neutralisation (siehe Kapitel 3.1) die Breite der direkten Strahlen nur schwach beeinflusst und zum anderen sind aufgrund der Symmetrie der Kurve für He^0 -Atome Anteile von metastabilem Helium nicht nachweisbar, was die Streuung von Atomen im Grundzustand gewährleistet.

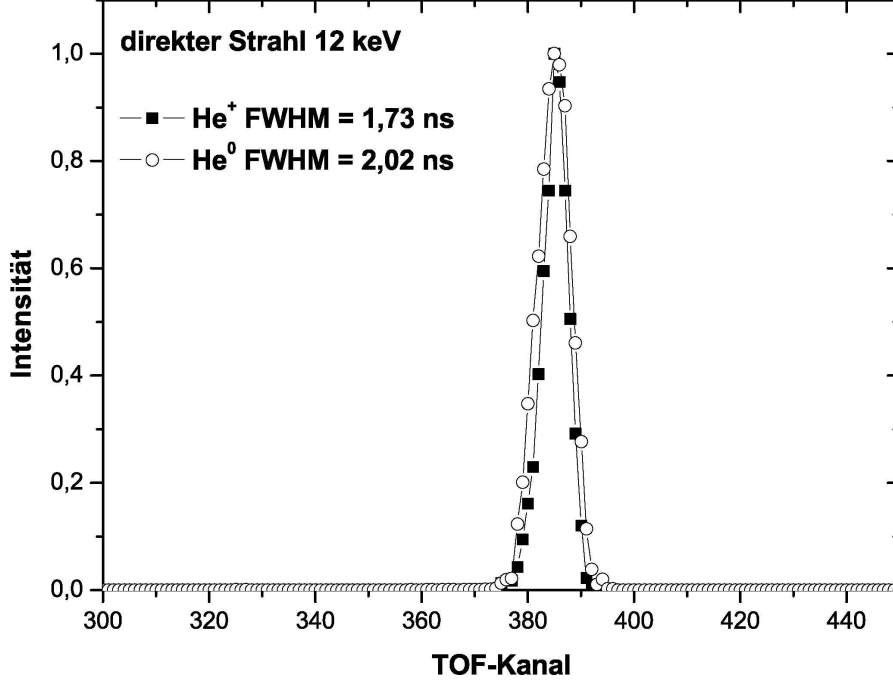


Abbildung 3.3: TOF-Spektren für 12 keV He^+ und He^0

Die Bestimmung des bei der Streuung am Target auftretenden Energieverlustes wird durch die zeitliche Differenz des Streusignals zum direkten Strahl bestimmt. Da die Geschwindigkeiten der Atome bei allen Messungen im nicht relativistischen Bereich liegen, lässt sich die Flugzeit t_0 des direkten Strahles aus der klassischen kinetischen Energie berechnen.

$$E_0 = \frac{m}{2} v^2 = \frac{m}{2} \left(\frac{s}{t_0} \right)^2 \quad (3.2)$$

Aus der Flugzeitdifferenz Δt der gestreuten Projektile resultiert ihre Energie E_1 zu

$$E_1 = E_0 - \Delta E = \frac{m}{2} \left(\frac{s}{t_0 + \Delta t} \right)^2 \quad (3.3)$$

Aus Gleichung 3.2 und Gleichung 3.3 lässt sich schließlich der Energieverlust bestimmen.

$$\Delta E = \frac{m}{2} \left(\frac{s}{\sqrt{\frac{m}{2E_0}} s + \Delta t} \right)^2 \quad (3.4)$$

Zur Separation unterschiedlicher Ladungszustände im Flugzeitspektrum, die nach der Streuung der neutralen Teilchen auftreten können, dient ein isolierter 20 cm

langer Metallzylinder, den die gestreuten Projektile durchlaufen. Durch Anlegen einer Spannung an diesen Zylinder ändert sich abhängig vom Ladungszustand die Flugzeit der Ionen innerhalb des elektrischen Feldes, ohne ihre Energie am CEM zu beeinflussen. Aufgrund der geringen Divergenz der direkten Strahlen ändert sich die Bahn der Projektile durch das Feld nicht. Durch die Streuung an der Oberfläche besitzen die gestreuten Strahlen eine höhere Divergenz als der direkte. Dadurch kann es für diese Teilchen zu einer Fokussierung bzw. Defokussierung beim Durchfliegen des geladenen Zylinders kommen, sodass exakte Angaben über die Ladungsanteile nach der Streuung nicht möglich sind.

3.3 Elektronennachweis

Die bei der Wechselwirkung des Projektils mit dem Target emittierten Elektronen werden mit Hilfe eines Elektronendetektors nachgewiesen. Der prinzipielle Aufbau des Detektors ¹ ist in Abbildung 3.4 dargestellt. Kernpunkt dieses Systems bildet ein Halbleiterdetektor (Passivated Implanted Planar Silicon (PIPS) detector PD-100-13-100AM) der Firma „Canberra“, der sich auf einem Hochspannungspotential von 25 kV befindet. Dadurch ist gewährleistet, dass alle im Detektor nachgewiesenen Elektronen in etwa die gleiche Energie von 25 keV besitzen. Trifft ein Elektron auf diesen Detektor entstehen in der Sperrschicht Elektronen-Loch-Paare, deren Anzahl und damit der resultierende Spannungspuls proportional zur deponierten Energie ist. In einem Abstand von ca. 1,5 cm vom Target befindet sich ein hochtransparentes Gitter, an dem eine Spannung von 100 V anliegt. Damit werden das Target von der Hochspannung des Detektors abgeschirmt und alle Elektronen des Halbraums über dem Target abgesaugt. Aus Trajektoriensimulationen mittels des Computerprogramms „SIMION“ und Testmessungen der Aumayr-Gruppe mit einer bekannten Strahlungsquelle [38] resultiert für den Elektronendetektor eine Nachweiswahrscheinlichkeit von 98 % für Elektronenenergien ≤ 50 eV.

Die Elektronik zur Auswertung der Pulshöhen arbeitet mit einer Zeitkonstanten von 1 μ s. Das bedeutet, dass alle Spannungspulse in dieser Zeit aufsummiert werden. Dadurch werden Mehr-Elektronen-Ereignisse als ein Signal mit entsprechend vervielfachter Pulshöhe registriert. Das Ausgangssignal des Elektronendetektors wird an einen zweiten ADC gesendet und von dort weiterverarbeitet. In Abbildung 3.5 ist ein koinzidentes Pulshöhenspektrum des Elektronendetektors bei der Streuung von 12 keV He^0 an Al(111) unter einem Einfallswinkel von $2,2^\circ$ dargestellt. Auf der Abzisse ist der Elektronenkanal angegeben. Er entspricht der Größe des entstehenden Spannungspulses und damit der Zahl der beteiligten Elektronen. Von Peak zu Peak erhöht sich die Zahl der Elektronen um eins. Die Ordinate gibt die Häufigkeit solcher Ein- oder Mehr-Elektronen-Ereignisse an. Neben den deutlichen Signalen für die einzelnen Elektronen sind Strukturen zwischen den Peaks zu erkennen. Diese Strukturen sind auf vom PIPS-Detektor reflektierte Elektronen zurückzuführen [39]. Diese reflektierten Elektronen deponieren nur einen Teil ihrer

¹Leihgabe der TU-Wien, Prof. F. Aumayr, Institut für Allgemeine Physik

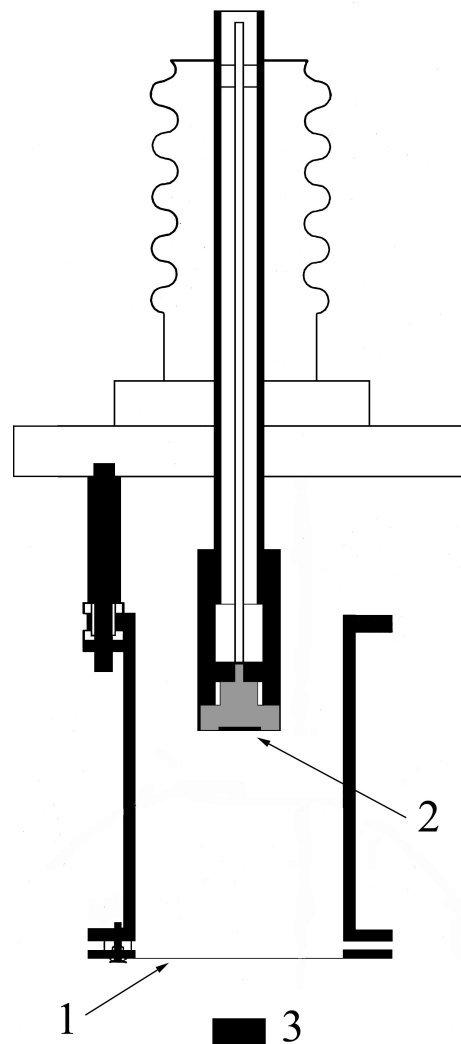


Abbildung 3.4: Skizze Elektrondetektor (1 Gitter, 2 PIPS-Detektor, 3 Target)

Energie in der Sperrschicht und erzeugen somit weniger Elektronen-Loch-Paare. Dadurch verschiebt sich der Schwerpunkt und somit die Elektronenausbeute zu kleineren Elektronenzahlen. Um die bei der Projektil-Target-Wechselwirkung entstehende wahre Elektronenausbeute zu bestimmen, müssen die reflektierten Anteile den wirklichen Elektronenzahlen zugeordnet werden. Die Reflexionswahrscheinlichkeit von Elektronen an Silizium beträgt nach [40] ca. 17 %. Aus Trajektorien-simulationen der reflektierten Elektronen in der Feldgeometrie des Detektors folgt, dass 17% dieser Elektronen wieder auf den Detektor gelenkt werden [38]. Damit ist die Gesamtwahrscheinlichkeit eines Elektrons, vom PIPS-Detektor reflektiert zu werden, $0,17 \cdot (1 - 0,17) = 0,14$. Mit Hilfe einer Binominalverteilung werden die gemessenen Spektren unter Berücksichtigung der Reflexionswahrscheinlichkeit angepaßt (Abbildung 3.6). Aus den somit erhaltenen Anteilen W_n (Flächen der

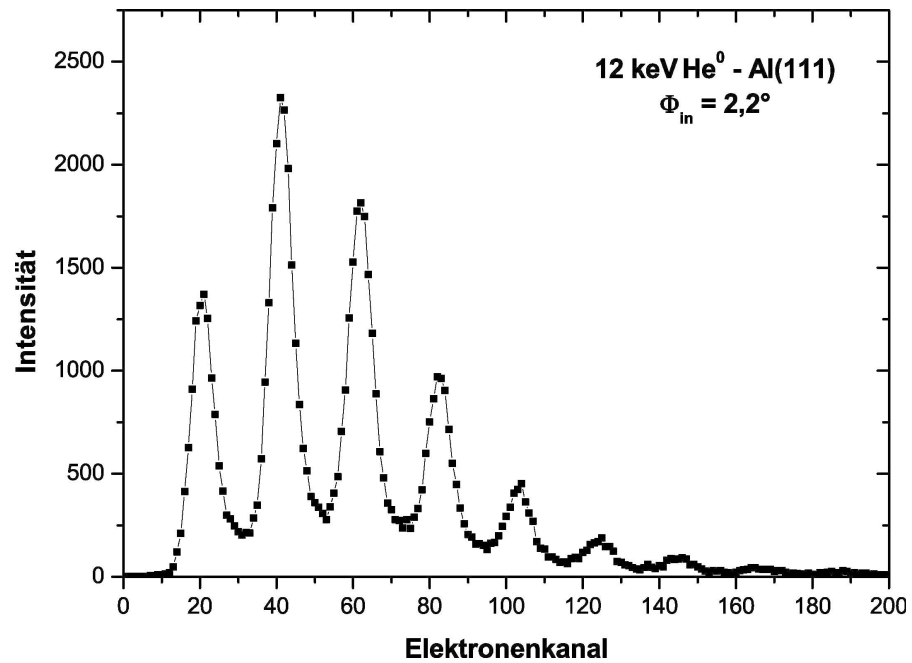


Abbildung 3.5: Pulshöhenspektrum des Elektronendetektors bei der Streuung von 12 keV He⁰ an Al(111) unter $\Phi_{in}=2,2^\circ$

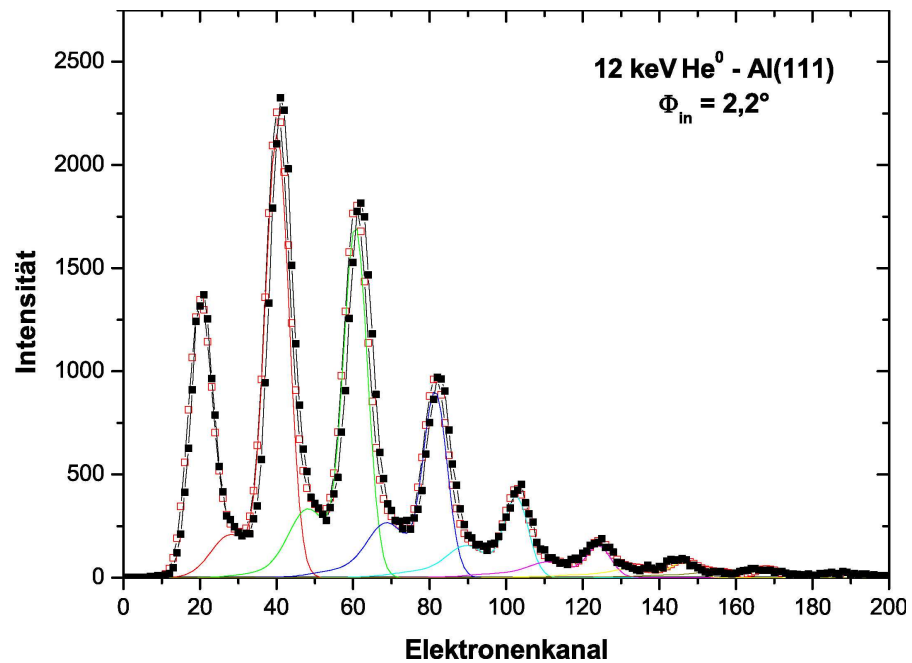


Abbildung 3.6: Korrigiertes Pulshöhenspektrum bei der Streuung von 12 keV He⁰ an Al(111) unter $\Phi_{in}=2,2^\circ$; schwarze Quadrate: Originalspektrum, Lini-enplots: Berücksichtigung der Reflexionen, offene rote Quadrate: Gesamtanpassung

einzelnen Elektronensignale) für die Emission von n Elektronen wird die Elektronenausbeute γ bestimmt.

$$\gamma = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \cdot W_n}{\sum_{n=0}^{\infty} W_n} \quad (3.5)$$

3.4 Koinzidenz

Um die Zahl der emittierten Elektronen mit dem beim Streuprozess auftretenden Energieverlust der einzelnen gestreuten Projektilen zu verknüpfen, ist es notwendig, koinzidente Messungen von Energieverlust und Elektronenzahl durchzuführen. Der schematische Aufbau der elektronischen Messanordnung ist in Abbildung 3.7 dargestellt. Das Ausgangssignal des ADC für den Projektilenergieverlust wird in einer Koinzidenzeinheit („BCI6-ACQ-1“ der Firma „Wieliczek + Siebert“) abgespeichert. Die Speicheradresse resultiert aus der Pulshöhe des TAC. Die bei der Wechselwirkung mit dem Target emittierten Elektronen haben eine geringere Flugzeit zum Elektronendetektor als die Projektilen zum CEM. Die Realisierung der koinzidenten Messung erfolgt durch eine Verzögerung des Elektronensignals. Die Verzögerungszeit resultiert aus der Flugzeit des Projektils zum CEM. Das über den zweiten ADC digitalisierte Ausgangssignal des Elektronendetektors wird dann ebenfalls an die Koinzidenzeinheit übertragen, wobei die Speicheradresse aus der Pulshöhe des Elektronendetektors folgt. Ein Signal wird immer dann abgespeichert, wenn ein Projektil am CEM nachgewiesen wird. Da dieses Ereignis unabhängig von der Zahl der auftretenden Elektronen ist, werden somit auch Streuereignisse registriert, bei denen kein Elektron emittiert wird. Bei einem frei laufenden Elektronendetektor hat man auf diese Information keinen Zugriff und W_0 muß über statistische Berechnungen oder zusätzliche Messungen bestimmt werden [41]. Durch die direkte Messung von W_0 können somit sehr kleine Elektronenausbeuten genau bestimmt werden.

In Abbildung 3.8 ist das Schema und das Ergebnis der koinzidenten Messung am Beispiel der Streuung von 12 keV He^0 an $\text{Al}(111)$ unter einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 2,2^\circ$ dargestellt. Durch die koinzidente Messung von Projektilenergieverlust und Elektronenzahl (charakterisiert durch den Elektronenkanal) entsteht ein zweidimensionales Spektrum, wie es in Abbildung 3.8 (d) gezeigt wird. Die beiden weiteren Abbildungen zeigen den integralen Energieverlust (c) und die integrale Elektronenausbeute (b), wie man sie ohne Koinzidenz bzw. durch Projektion des 2d-Spektrums in (d) erhält. Der erhebliche Informationsgewinn durch die Koinzidenz läßt sich an den deutlich voneinander getrennten Spalten des 2d-Spektrums erkennen. Diese Spalten repräsentieren den Energieverlust der Projektilen, die eine bestimmte Anzahl von Elektronen emittiert haben. Damit lassen sich, wie in den folgenden Kapiteln erläutert, Rückschlüsse auf den Emissionsprozess schließen. Zur Auswertung wird das 2d-Spektrum der einzelnen Elektronenspalten getrennt und

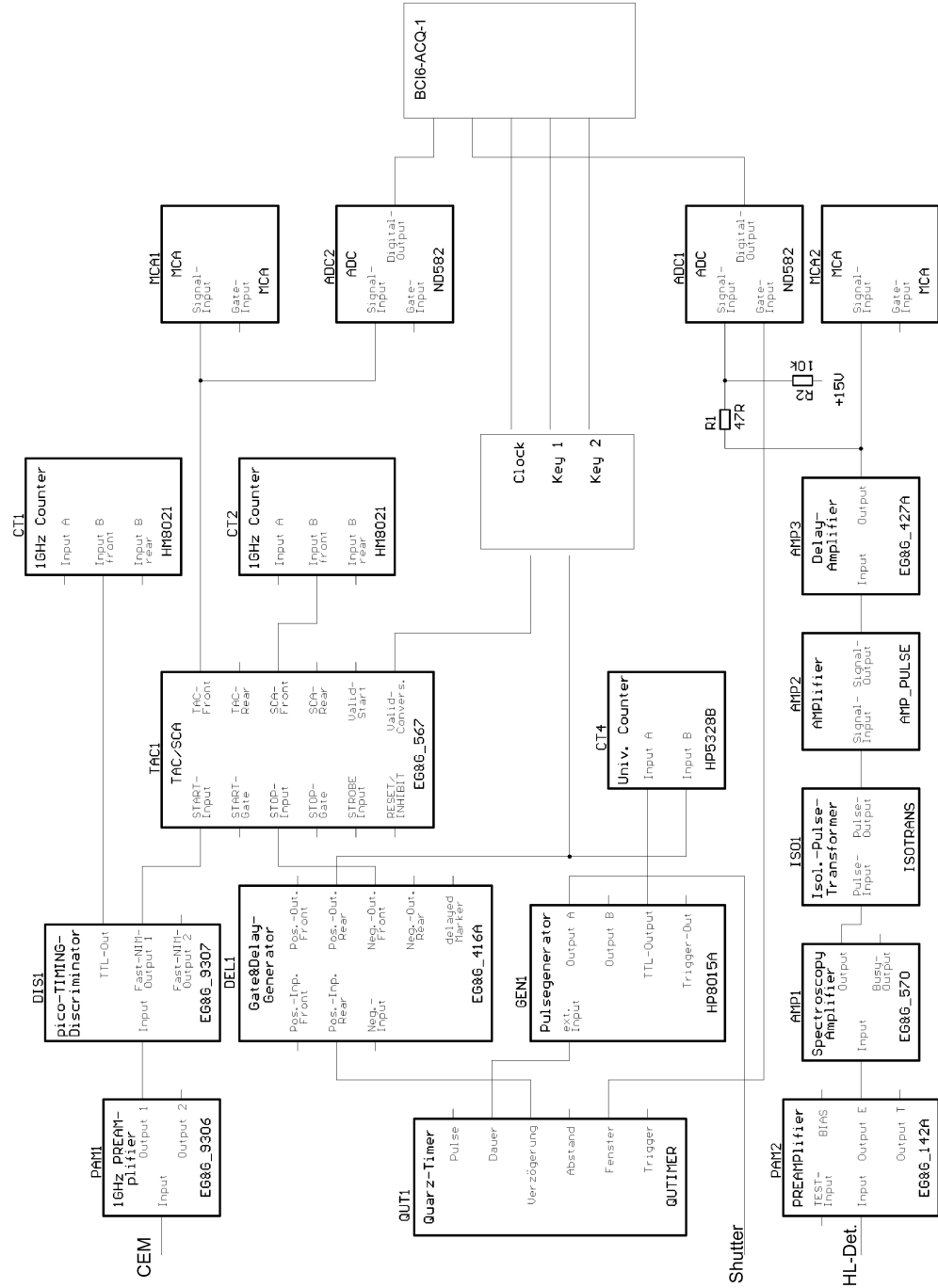


Abbildung 3.7: Elektronische Schaltung zur koinzidenten Erfassung von Projektilflugzeiten und Elektronenzahlen

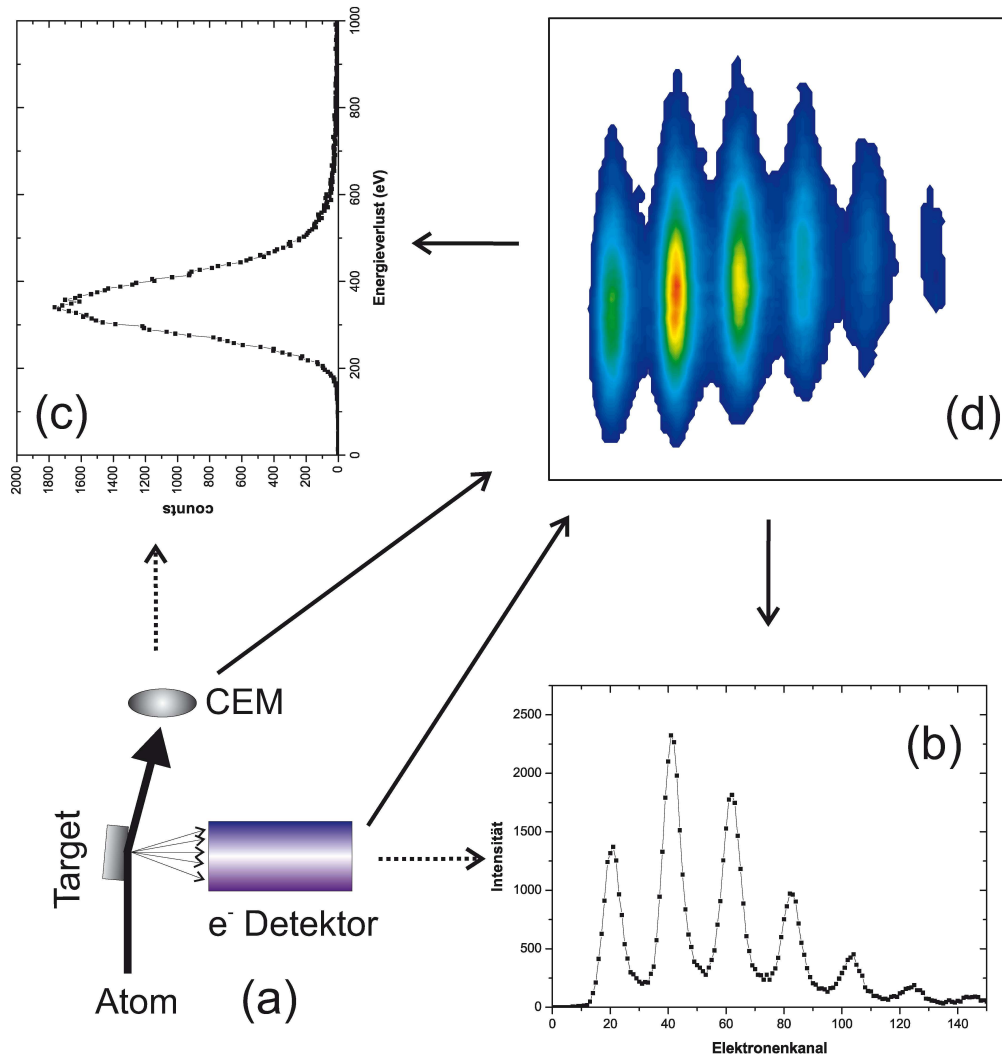


Abbildung 3.8: Koinzidentes Energieverlust-Elektronenzahl-Spektrum bei der Streuung von 12 keV He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in}=2, 2^\circ$ (Details siehe Text)

auf die Flugzeit- (Energieverlust-) Achse projiziert. In Abbildung 3.9 sind diese projizierten Schnitte für 0, 1 und 2 Elektronen dargestellt.

Zusätzlich zur koinzidenten Messung wird der Speicher der Koinzidenzeinheit bei jedem Puls am Plattenpaar ausgelesen. Kommt es zu einem Streuprozess an der Oberfläche bei dem das gestreute Projektil nicht am CEM nachgewiesen wird, ist es so trotzdem möglich, die Anzahl der emittierten Elektronen zu bestimmen. Zur Demonstration ist das nicht koinzidente Elektronenzahlspektrum für den Fall der Streuung von 12 keV Helium an Al(111) unter $\Phi_{in} = 2, 2^\circ$ in Abbildung 3.10 dargestellt. Die Dominanz des Peaks für die Emission von keinem Elektron folgt aus der hohen Pulsfrequenz und aus der Forderung für die TOF-Messung, dass stets nur ein Projektil in der Kammer ist. Dadurch ist die Anzahl der Streuprozesse innerhalb der Messzeit sehr gering, und es entstehen keine Elektronen. Werden keine Elektronen nachgewiesen, wird als Pulshöhe das Rauschen des Elektronendetektors

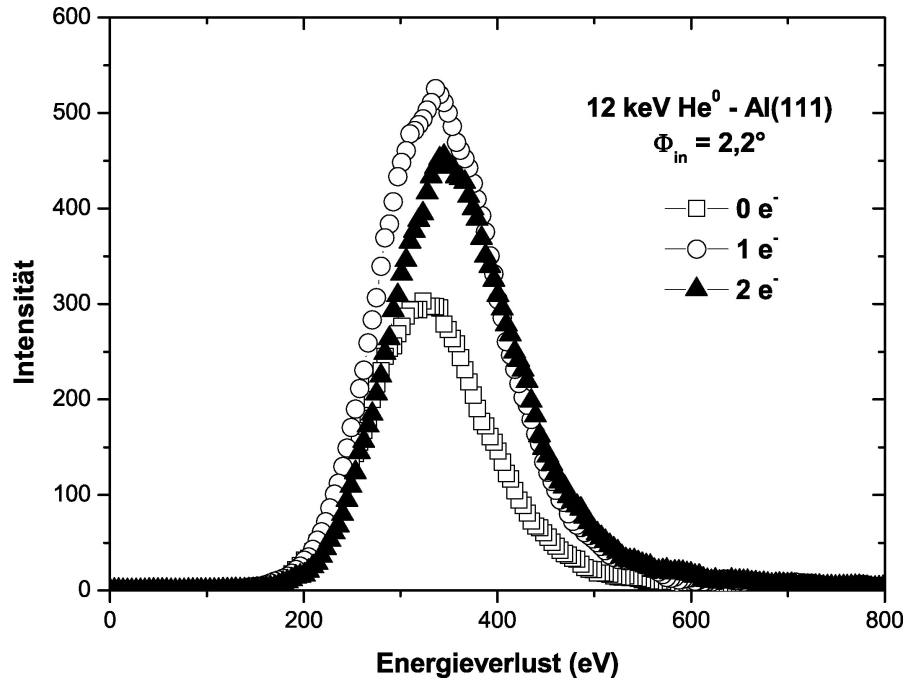


Abbildung 3.9: Energieverlustspektren für 0, 1 und 2 Elektronen bei der Streuung von 12 keV He⁰ an Al(111) unter $\Phi_{in}=2,2^\circ$

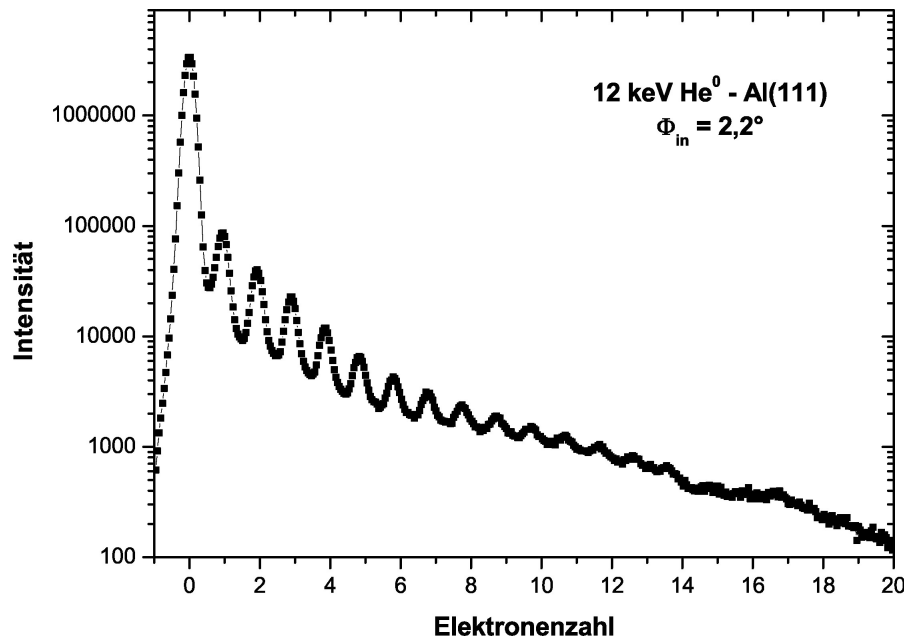


Abbildung 3.10: Nicht koinzidentes Elektronenzahlspektrum für die Streuung von 12 keV He⁰ an Al(111) unter $\Phi_{in}=2,2^\circ$

registriert.

Trotz der geringen Teilchendichte im direkten Projektilstrahl (siehe Kapitel 3.2) existiert eine endliche Wahrscheinlichkeit P_{2Pr} von Zwei-Teilchen-Streuungen. Wer-

den zwei Projektilen innerhalb eines Paketes am Target gestreut und erreichen das Channelplate, wird aufgrund der Zeitauflösung des CEM nur das schnellere nachgewiesen. Dadurch ist es möglich, dass einmal dem im CEM nachgewiesenen Teilchen eine zu hohe Elektronenzahl zugeordnet wird und zum anderen mit dem Elektronenpeak ein zu geringer Energieverlust verknüpft ist. Aus diesem Grund werden die koinzidenten Elektronenzahlen durch statistische Annahmen korrigiert. Sind $W_{0e^-}^{exp}$, $W_{1e^-}^{exp}$ und $W_{2e^-}^{exp}$ die experimentell bestimmten Anzahlen für Ereignisse mit der Emission von keinem, einem und zwei Elektronen, resultieren die tatsächlichen Anteile mit den folgenden Gleichungen zu W_{0e^-} , W_{1e^-} und W_{2e^-} .

$$\begin{aligned}
 W_{0e^-} &= \frac{W_{0e^-}^{exp}}{1 - P_{2Pr}P_{2Pr}^{e^-}(1 + P_{2Pr}^{e^-})} \\
 W_{1e^-} &= \frac{W_{1e^-}^{exp} - W_{0e^-}P_{2Pr}P_{2Pr}^{e^-}}{1 - P_{2Pr}P_{2Pr}^{e^-}} \\
 W_{2e^-} &= W_{2e^-}^{exp} - P_{2Pr}P_{2Pr}^{e^-}(W_{1e^-} + W_{0e^-}P_{2Pr}^{e^-})
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

Dabei ist $P_{2Pr}^{e^-}$ die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das nicht nachgewiesene Projektil zu Elektronenemission führt. Aus den so bestimmten realen Anteilen W_{ie^-} ($i = 0..2$) läßt sich dann die Elektronenausbeute γ bestimmen.

Kapitel 4

Charakterisierung der untersuchten Oberflächen

4.1 Geometrische Struktur und Präparation

In den Experimenten dieser Arbeit wurden die Al(110)-, die Al(111)- sowie die Cu(111)-Oberfläche untersucht. Sowohl Aluminium als auch Kupfer besitzen eine fcc-Einheitszelle. In Abbildung 4.1 ist die oberste Atomlage für einen (110)- und einen (111)-Schnitt eines fcc-Kristalls skizziert.

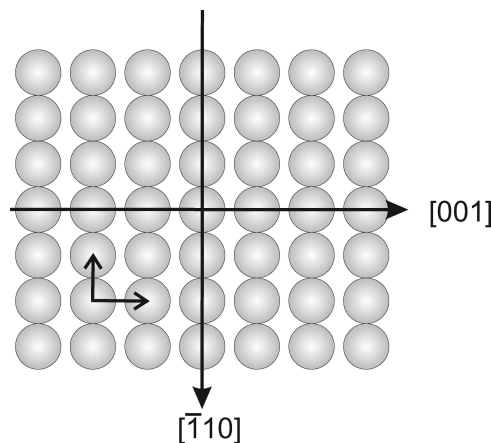


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung der ersten Atomlage einer (110)-Oberfläche mit Einheitsvektoren und Hauptrichtungen

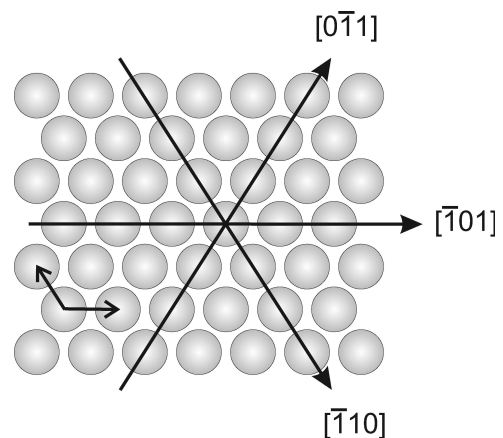


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung der ersten Atomlage einer (111)-Oberfläche mit Einheitsvektoren und Hauptrichtungen

Zusätzlich zu den Atomen sind die Einheitsvektoren und Hauptkristallrichtungen dargestellt. Die (110)-Oberfläche besitzt eine zweizählige Symmetrie, die (111)-Fläche eine sechszählige. Um Effekte, die durch axiales Channeling auftreten können, zu vermeiden, wurden bis auf Kapitel 7 alle Experimente entlang einer hoch

indizierten Kristallrichtung (Random-Streuung, planares Oberflächen-Channeling) durchgeführt. Die Länge der Einheitsvektoren beträgt bei der (111)-Fläche $a_0/\sqrt{2}$, wobei a_0 der Gitterkonstanten entspricht. Im Fall der (110)-Oberfläche ist die Länge des Einheitsvektors parallel zur $[\bar{1}10]$ Richtung $a_0/\sqrt{2}$ und parallel zur $[001]$ Richtung a_0 . Die Gitterkonstante von Aluminium ist $a_0(Al) = 4,05 \text{ nm} = 7,656 \text{ a.u.}$ und für Kupfer $a_0(Cu) = 3,61 \text{ nm} = 6,824 \text{ a.u.}$.

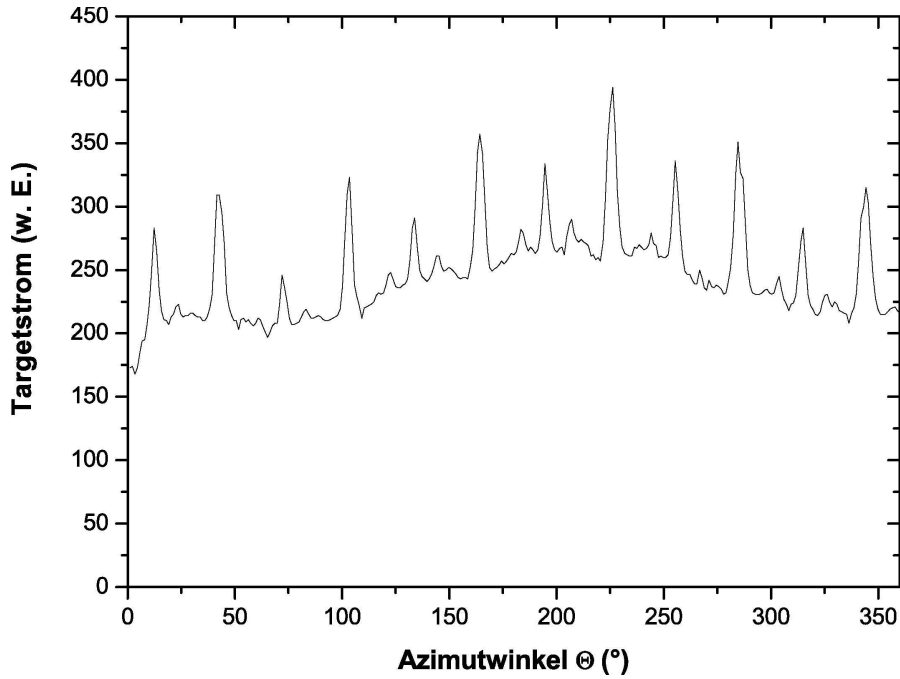


Abbildung 4.3: Targetstromkurve beim Sputtern der Al(111)-Oberfläche mit 100 keV Ar^+ unter $\Phi_{in} = 2^\circ$

Im Regime der streifenden Streuung bewegen sich die Projektile über einen langen Zeitraum in einem geringen Abstand zur Oberfläche. Um dies ohne Störungen zu ermöglichen, ist die Qualität der Oberfläche von essentieller Bedeutung. Vor dem Einbau in die Streukammer werden die Kristalle mit einer $0,5 \mu\text{m}$ Poliermittelkörnung poliert. Damit werden makroskopische Rauigkeiten entfernt. Die weiteren Schritte der Präparation erfolgen dann unter UHV-Bedingungen. Durch die makroskopische Behandlung der Oberflächen entstehen Schäden im μm -Bereich. Diese Defekte sowie Stufen und Fremdatome werden durch streifenden Ionenbeschuss entfernt. Das Target wird dazu mit einem 100 keV Ar^+ -Ionenstrahl unter einem Einfallswinkel von ca. 2° beschossen (Ionenstrahl-Sputtern). Die Intensität des Sputterstrahls beträgt ca. $3 - 4 \mu\text{A}$. Ein gleichmäßiges Abtragen von der Oberfläche wird durch die azimutale Drehung des Kristalls um die Oberflächennormale erreicht. In Abbildung 4.3 ist exemplarisch für die drei Oberflächen der beim Sputtern am Al(111)-Target gemessene Strom als Funktion des Azimutwinkels aufgetragen. Die Peaks in der Kurve entsprechen den niedrig indizierten Kristallrichtungen $\langle \bar{1}01 \rangle$, $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$ und $\langle 0\bar{1}1 \rangle$. An diesen dominierenden Signalen läßt sich sehr gut die sechszählige Symmetrie der (111)-Oberfläche erkennen. Die durch das Sput-

tern auftretenden Strahlenschäden werden durch Tempern des Targets bei einer Temperatur von $T \leq 500 \text{ }^\circ\text{C}$ ausgeheilt. Die Qualität der Oberfläche wird anschließend durch Streuverteilungen, wie in Abbildung 4.4 dargestellt, kontrolliert. Bei dieser Messung beträgt der Streuwinkel $\Phi_s = 4,78^\circ$ und die volle Halbwertsbreite $FWHM = 0,8^\circ$. Die geringe Halbwertsbreite und das Fehlen starker Ausläufer auf der unter- und überspekularen Flanke sind Zeichen für eine große Terrassenbreite und damit für eine geringe Stufendichte [42].

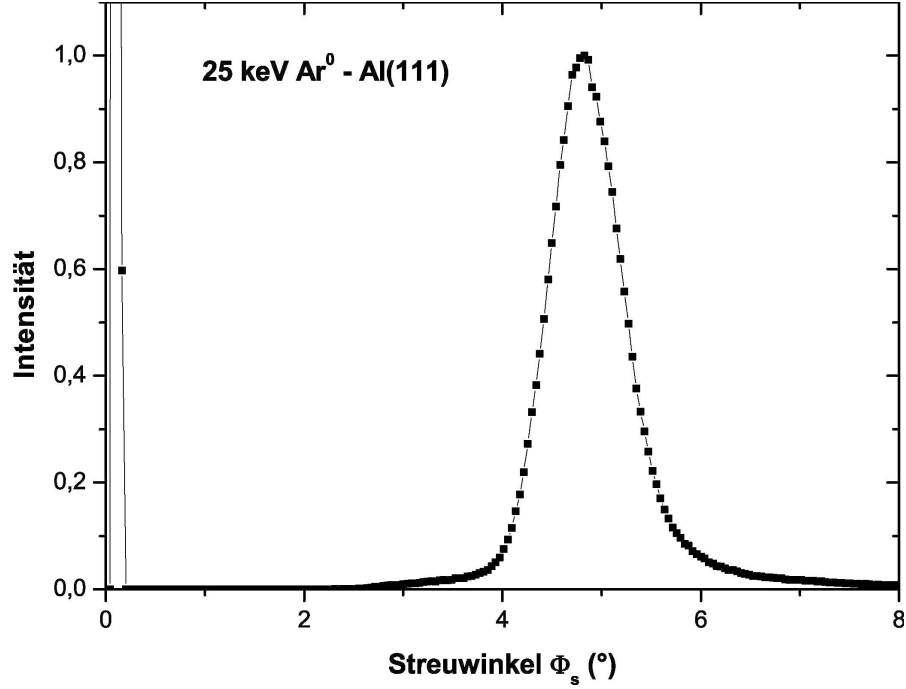


Abbildung 4.4: Streuverteilung bei der Streuung von 25 keV Ar^0 an $\text{Al}(111)$

4.2 Elektronische Struktur

Die elektronische Struktur von Metallen lässt sich im einfachsten Fall mit dem Modell des freien Elektronengases beschreiben. In diesem Modell werden die positiven Ionen durch eine konstante positive Ladungsdichte $\rho_0 = \frac{N_e}{V}$ ersetzt („Jellium Modell“). Die Lösung für die Bewegung von Elektronen in dem somit entstandenen Potentialtopf bilden ebene Wellen (Gl. 4.1),

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp[i\vec{k}\vec{r}] \quad (4.1)$$

mit Eigenenergien

$$E_k = \frac{k^2}{2}. \quad (4.2)$$

Die Zustandsdichte für den dreidimensionalen Fall des freien Elektronengases ist

$$D(E) = \frac{\sqrt{2E}}{\pi^2} . \quad (4.3)$$

Bei der Temperatur $T = 0$ K sind alle Zustände bis zur Fermi-Energie E_F besetzt.

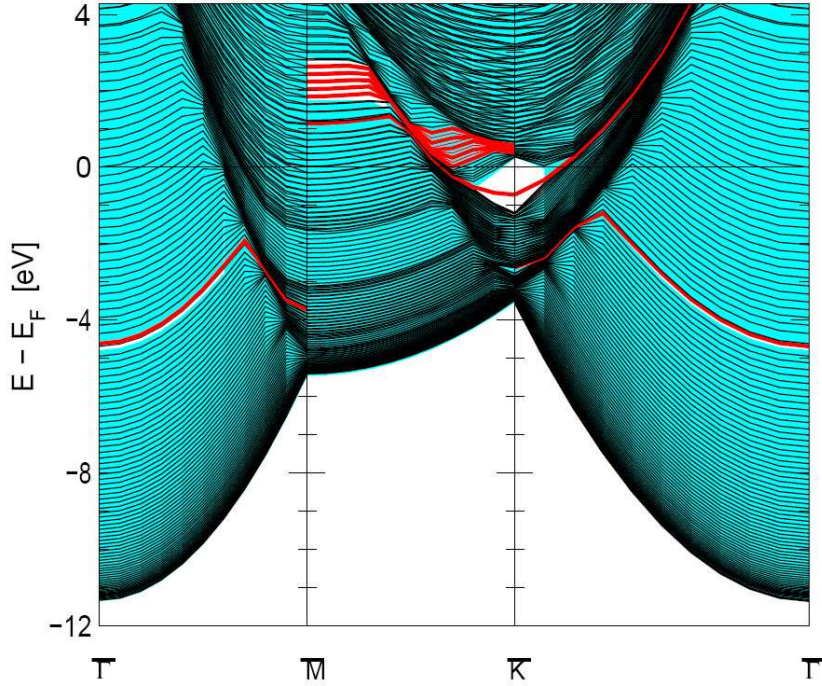


Abbildung 4.5: Bandstruktur von Al(111) [43]

Aufgrund der gleichen Wahrscheinlichkeit der Elektronenimpulse entsteht daraus für den dreidimensionalen Fall im Impulsraum die Fermi-Kugel mit dem Radius $k_F = \sqrt{2E_F}$. Für den Fall $T > 0$ K wird die Besetzung der elektronischen Zustände durch die Fermi-Dirac-Verteilung ($f(T, E)$, Gl. 4.4) wiedergegeben:

$$f(T, E) = \frac{1}{\exp \left[\frac{E - E_F}{k_B T} \right] + 1} \quad (4.4)$$

(k_B : Boltzmann-Konstante).

In der Praxis kommt Aluminium dem Modell des freien Elektronengases am nächsten [44]. Eine wichtige Größe zur Charakterisierung von Metallen ist der Ein-Elektronen-Radius r_s . Er beschreibt das Volumen einer Kugel, in dem sich ein Elektron befindet. Für Aluminium beträgt $r_s = 2,07$ a.u.. Dieser Wert ist sehr nahe an dem Wert für das freie Elektronengas von $r_s = 2,00$ a.u.. Die Fermi-Energie für Aluminium beträgt $E_F = 10,6$ eV = 0,389 a.u. [44].

Geht man von dem Ansatz des unendlich ausgedehnten Festkörpers (wie beim „Jellium-Modell“) zu realen Kristallen über, und berücksichtigt das durch die Lokalisierung der Atomrümpfe periodische Potential, bilden sich energetische Lücken

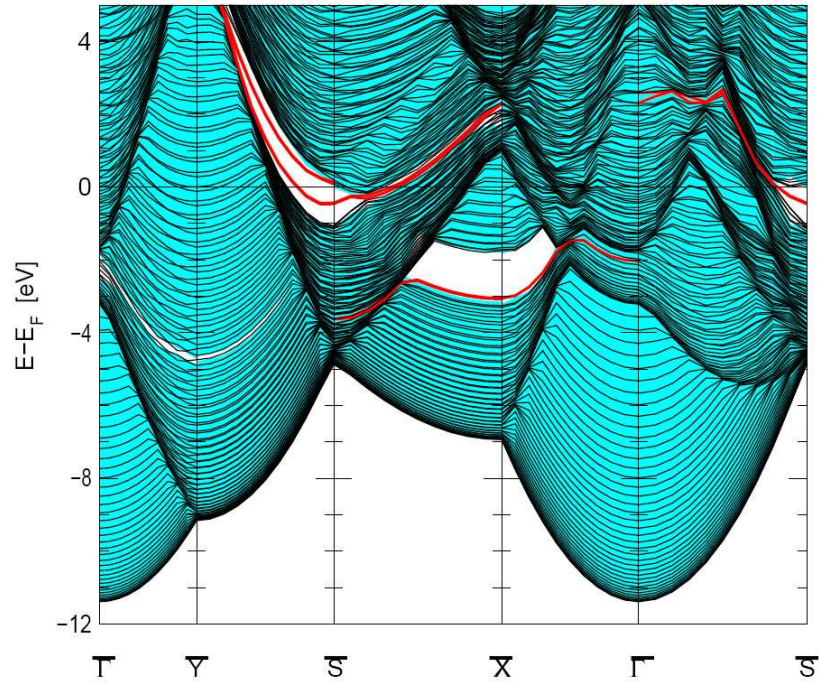


Abbildung 4.6: Projizierte Bandstruktur von Al(110) [43]

in der Bandstruktur. In diesen Bandlücken bilden sich Zustände, die im Volumen des Festkörpers nicht existieren. Es wird zwischen zwei Arten von Zuständen unterschieden. Zum einen gibt es die intrinsischen Oberflächenzustände (SS) nach Tamm [46] und Shockley [47], welche an der Oberflächenlage lokalisiert sind. Zum anderen existieren Zustände im Energiebereich oberhalb der Vakuum-Energie ($E > E_V$). Diese Bildladungszustände (IS) werden durch das anziehende Bildladungspotential und die abstoßende Oberflächen-Barriere gebildet.

In Abbildung 4.5 ist die Bandstruktur von Al(111) abgebildet [43]. Trotz der Störung durch die Oberfläche treten nur sehr schmale Bandlücken auf. Dies gilt insbesondere für das Zentrum der Oberflächen-Brillouin-Zone ($\bar{\Gamma}$) [43]. Abbildung 4.6 zeigt die berechnete Bandstruktur von Al(110) [43]. Analog zur (111)-Oberfläche treten auch hier vor allem im $\bar{\Gamma}$ -Punkt nur sehr kleine Bandlücken auf.

Die projizierte Bandstruktur der Cu(111)-Oberfläche ist in Abbildung 4.7 dargestellt [45]. Die in der Abbildung angegebenen Energien beziehen sich auf die Fermi-Energie E_F . Deutlich zu erkennen ist die projizierte, sich von $-0,89$ eV bis $4,25$ eV (bezogen auf E_F) erstreckende Bandlücke im Zentrum der Oberflächen-

	Al(110)	Al(111)	Cu(111)
Z	13	13	29
E_F (eV)	10,6	10,6	9,0
W (eV)	4,24	4,29	5,0

Tabelle 4.1: Elektronische Eigenschaften von Al(110), Al(111) und Cu(111)

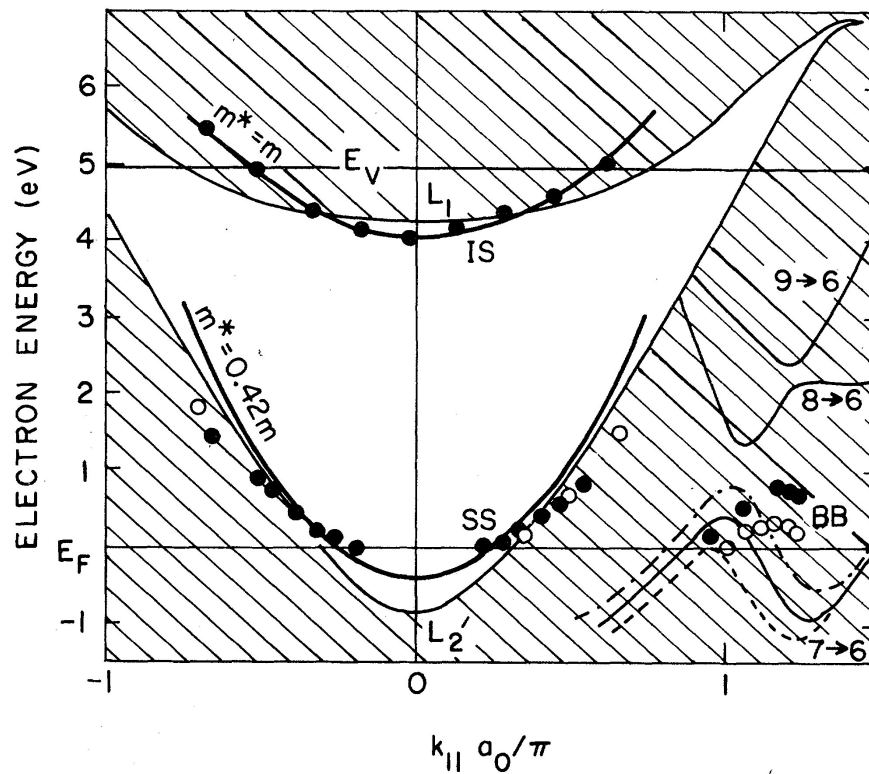


Abbildung 4.7: Projizierte Bandstruktur von Cu(111) [45]

Brillouin-Zone ($\bar{\Gamma}$), in der sich senkrecht zur Oberfläche keine Elektronen bewegen können. Der Oberflächenzustand liegt bei $-0,39$ eV (bezogen auf E_F). In Tabelle 4.1 sind wichtige elektronischen Größen der Al(110)-, der Al(111)- und der Cu(111)-Oberfläche zusammengefasst.

Kapitel 5

Untersuchungen zur Streuung von Heliumatomen

Der Energieverlust bei der Streuung von Atomen oder Ionen an Oberflächen setzt sich aus verschiedenen Prozessen zusammen. Ein Anteil ist die Folge von binären Stößen des Projektils mit einzelnen Targetelektronen (elektronische Anregung). Der zweite Anteil tritt beim binären elastischen Stoß des Projektils mit einzelnen Targetatomen auf und wird als nuklearer Energieverlust bezeichnet. Neben diesen Zweikörperwechselwirkungen kann es jedoch auch zu kollektiven Anregungen von Elektronen (Oberflächenplasmonen) oder Targetatomen (optische Phononen) kommen, wodurch das Projektil ebenfalls kinetische Energie verliert. Bei der streifenden Streuung und der daraus resultierenden Oberflächengitterführung ist der nukleare Energieübertrag in der Regel sehr klein und kann im Vergleich zum elektronischen Energieverlust vernachlässigt werden.

Die Streuung von Atomen oder Ionen an Oberflächen von Festkörpern kann zur Emission von Elektronen führen. Die totale Elektronenausbeute hängt dabei von der Projektilspezies, der Streuenergie, den strukturellen und elektronischen Eigenschaften der Oberfläche sowie der Streugeometrie ab. Schnelle Ionen können durch den Transfer von kinetischer Energie Elektronen emittieren (kinetische Elektronenemission - KE). Zusätzlich kann die im Projektil gespeicherte Energie zur Potentialemission (PE) führen, wobei keine kinetische Energie notwendig ist. Eine exakte Trennung dieser beiden Emissionsmechanismen bei der Streuung von Ionen ist nicht möglich, da die totale Elektronenausbeute stets die Summe aus beiden Emissionskanälen darstellt. Zur Untersuchung der reinen kinetischen Elektronenemission wurden in dieser Arbeit Atome im Grundzustand gestreut, wodurch die Potentialemission ausgeschlossen werden konnte.

5.1 Energieverlust bei der Streuung von Heliumatomen

In diesem Abschnitt wird auf die Ergebnisse zur Untersuchung des Energieverlustes bei der Streuung von Heliumatomen im Grundzustand eingegangen. In Abbildung 5.1 sind die Energieverluste als Funktion der Projektilenergie bei der Streuung von He^0 an $\text{Al}(111)$ für verschiedene Einfallswinkel dargestellt. Die Messungen wurden

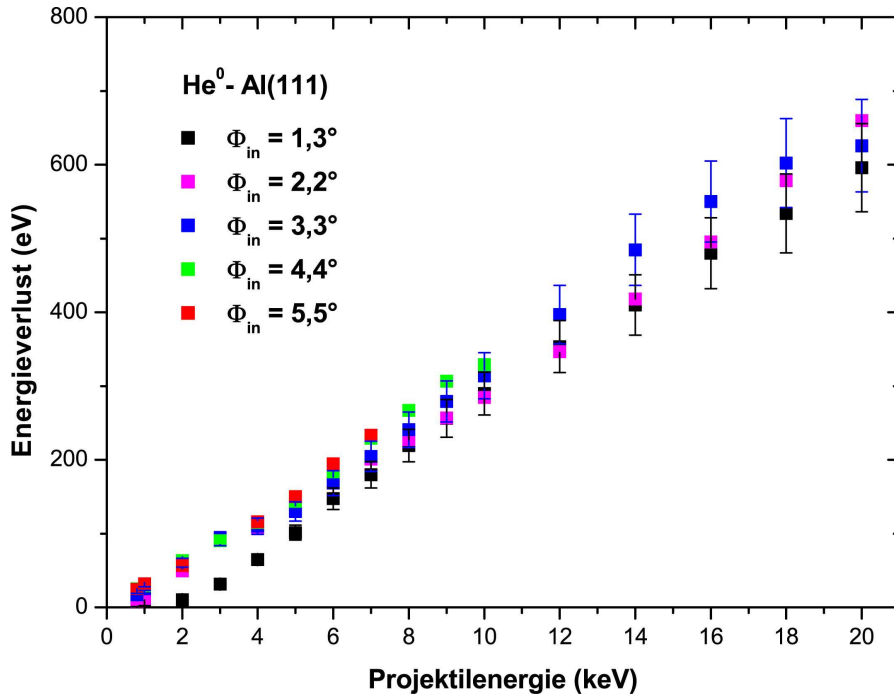


Abbildung 5.1: Energieverluste bei der Streuung von He^0 an $\text{Al}(111)$ als Funktion der Projektilenergie für verschiedene Einfallswinkel Φ_{in}

nur für Senkrechtenenergien durchgeführt, die kleiner als die kritische Energie dieses Systems sind ($E_c \approx 66$ eV). Dadurch erfassen die Daten für kleine Einfallswinkel einen größeren Projektilenergiebereich als die der größeren. Bei allen Winkeln ist eine Proportionalität zur Primärenergie zu erkennen. Der lineare Zusammenhang $\Delta E \sim E$ wurde in früheren Arbeiten zum Energieverlust von He^+ -Ionen bei der streifenden Streuung an einer $\text{Al}(111)$ -Oberfläche nachgewiesen [29]. Jedoch zeigen die Energieverluste in [29] keine signifikante Abhängigkeit vom Einfallswinkel. Dieses Resultat kann in Abbildung 5.1 nicht bestätigt werden. Ein ähnliches Bild ergibt sich für die Streuung von Helium an der $\text{Cu}(111)$ -Oberfläche. In Abbildung 5.2 sind analog zur Streuung an $\text{Al}(111)$ die Energieverluste für das System He^0 - $\text{Cu}(111)$ als Funktion der Projektilenergie dargestellt ($E_c \approx 167$ eV). Der Unterschied in den Elektronendichten von $\text{Al}(111)$ und $\text{Cu}(111)$ sollte die generellen Abhängigkeiten nicht verändern. Dies kann durch die auch in Abbildung 5.2 vorliegende Proportionalität bestätigt werden.

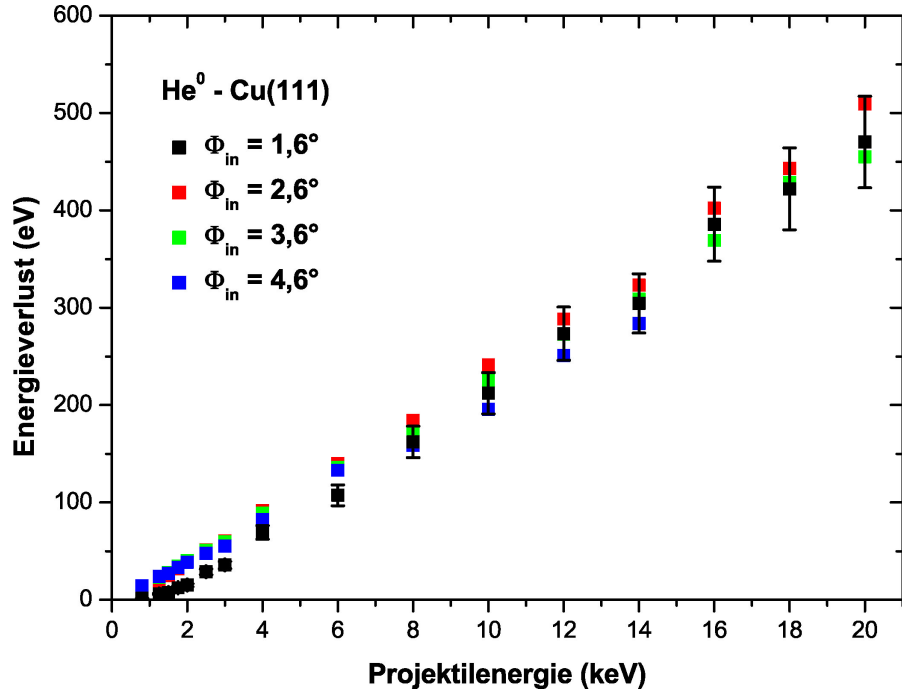


Abbildung 5.2: Energieverluste bei der Streuung von He^0 an $\text{Cu}(111)$ als Funktion der Projektilenergie für verschiedene Einfallswinkel Φ_{in}

Bei Streuexperimenten, insbesondere im Regime des planaren Oberflächen-Channels, spielt die Trajektorie des Projektils eine entscheidende Rolle. Unabhängig von den experimentellen Gegebenheiten ist hingegen die sogenannte Bremskraft („stopping power“) $S(Z, n_e, v) = -\frac{dE}{dx}$, welche vom Projektil (hier repräsentiert durch Z), von der Projektilgeschwindigkeit v und der Oberfläche (hier charakterisiert durch die Elektronendichte n_e) abhängt. Wichtige Fortschritte bei der experimentellen Untersuchung und analytischen Beschreibung von Energieverlusten bei der streifenden Streuung wurden von Kimura et al. [14] bei der Wechselwirkung von leichten Ionen mit Energien im MeV-Bereich an einer $\text{SnTe}(001)$ -Oberfläche erzielt. Aufgrund der definierten Oberfläche konnte in dieser Arbeit ΔE in Abhängigkeit von der Trajektorie kontrolliert untersucht werden. Aufbauend auf der Kenntnis des Verlaufs der Trajektorie wurde die „stopping power“ bei konstanter Energie auf einen einfachen exponentiellen Ansatz reduziert.

$$S(z) = S_0(E) \exp[-A \cdot z] \quad (5.1)$$

Unter Verwendung der langreichweitigen Komponenten α_1 und β_1 des Moliere-Potentials (Tabelle 2.2) und der Oberflächenteilchendichte n kann die Trajektorie beschrieben werden durch [14]

$$z(x) = \frac{a_F}{\beta_1} \ln \left[\frac{2\pi n Z_1 Z_2 a_F \alpha_1}{E_0 \Phi_{in}^2 \beta_1} \cosh^2 \left(\frac{\beta_1 \Phi_{in} z}{2a_F} \right) \right] . \quad (5.2)$$

Aus der Integration über die Trajektorie und der Substitution $\beta = 2a_F A / \beta_1 - 1$

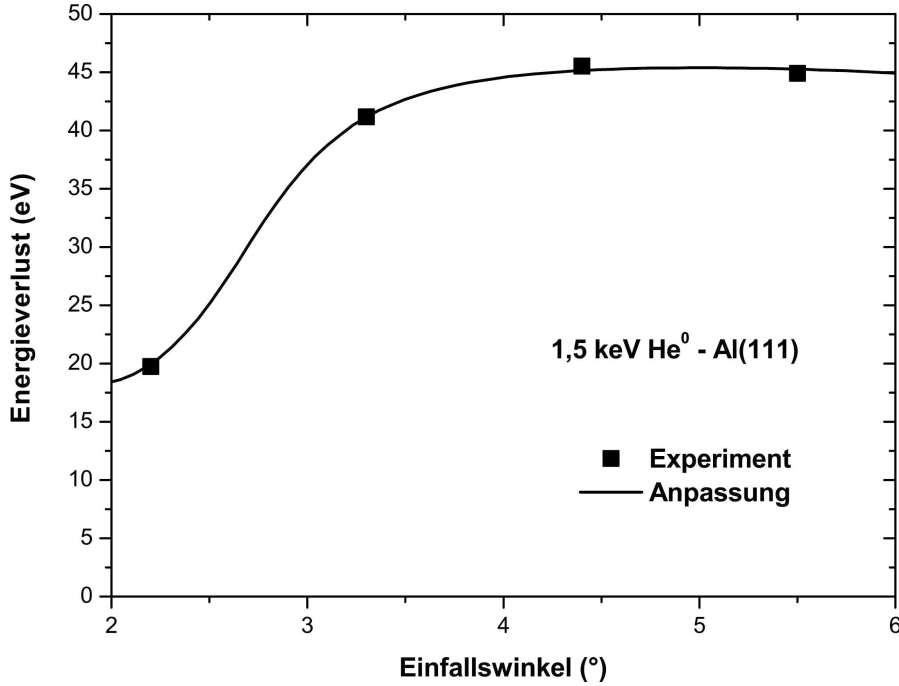


Abbildung 5.3: Experimentelle Energieverluste als Funktion des Einfallswinkels und Anpassung durch Gleichung 5.5 bei der Streuung von 1,5 keV He^0 an Al(111)

resultiert dann eine Gleichung für den Energieverlust [14, 48].

$$\Delta E = \int_{\text{Traj.}} S(z, E) dx \quad (5.3)$$

$$= 2\sqrt{\pi} \frac{a_F}{\beta_1} \left(\frac{\beta_1 E}{2\pi n Z_1 Z_2 \alpha_1 a_F} \right)^{\frac{1+\beta}{2}} \frac{\Gamma\left(\frac{1+\beta}{2}\right)}{\Gamma\left(1 + \frac{\beta}{2}\right)} S_0(E) \Phi_{in}^\beta \quad (5.4)$$

Für eine feste Energie folgt aus Gleichung 5.4 $\Delta E = B \cdot E^{(1+\beta)/2} \Phi_{in}^\beta$ und für einen festen Einfallswinkel $\Delta E = C \cdot E^{(1+\beta)/2} S_0(E)$. Bei der Streuung von sehr schnellen Wasserstoff- und Heliumionen an SnTe(001) ($v \gg v_0$) fanden Kimura et al. eine Unabhängigkeit des Energieverlustes vom Einfallswinkel, woraus direkt $\beta = 0$ folgt. Die experimentellen Daten zeigten ebenfalls eine Invarianz zur Projektilenergie. Daraus resultiert $B \sim E^{-1/2}$ und $S_0 \sim E^{-1/2}$. Die Unabhängigkeit vom Einfallswinkel konnte für die Streuung von He^+ -Ionen mit Energien $E_0 \leq 120$ keV an Al(111) bei Einfallswinkeln $\Phi_{in} \leq 2^\circ$ bestätigt werden [29]. Auth et al. [48, 49] fanden bei der streifenden Streuung von Protonen an Al(111) oberhalb einer Energie von ca. 50 keV ebenfalls einen energieunabhängigen Energieverlust.

Wie in Kapitel 2.3 beschrieben wurde, ist das Moliere-Potential für die genaue Beschreibungen der Trajektorie von Heliumatomen vor den in dieser Arbeit untersuchten Oberflächen eine unzureichende Näherung. Die analytischen Diskussionen finden somit keine Anwendung bei der Bestimmung der „stopping power“. Der exponentielle Ansatz einer vom Abstand abhängenden „stopping power“ bleibt von

dem Wechselwirkungspotential unberührt. Aus der Winkelabhängigkeit des Energieverlustes bei fester Projektilenergie und der Integration über die Trajektorie wurden die Parameter $S_0(E)$ und $z_0(E)$ (Zerfallslänge) bestimmt.

$$\Delta E(\Phi_{in}) = \int_{Traj.} S_0(E) \exp \left[-\frac{z}{z_0(E)} \right] dx \quad (5.5)$$

In Abbildung 5.3 sind die experimentellen Energieverluste (Quadrate) bei der Streuung von 1,5 keV Helium an Al(111) als Funktion des Einfallswinkels dargestellt. Zusätzlich ist der beste Fit mittels Gleichung 5.5 ($S_0 = 1,9$ eV/a.u., $z_0 = 1,35$ a.u.) als Kurve eingezeichnet.

Auf analoge Weise ergeben sich die in Abbildung 5.4 (a) dargestellten Parameter S_0 (offene Kreise) und z_0 (volle Quadrate) als Funktion der Projektilgeschwindigkeit. Durch die Eliminierung der Trajektorie über den Ansatz in Gleichung 5.5 resultiert eine von der Geschwindigkeit unabhängige Zerfallslänge z_0 . Der Parameter S_0 , in Gleichung 5.5 die extrapolierte „stopping power“ für den Festkörper, steigt proportional zur Projektilgeschwindigkeit an. Die Auswertung für die Streuung von Helium an Cu(111) ist in Abbildung 5.4 (b) dargestellt. Aufgrund der metallischen Eigenschaften beider Oberflächen verhalten sich die Parameter analog. Für Kupfer ist die Zerfallslänge z_0 kleiner als für Aluminium. Dies ist die Folge der geringeren Elektronendichte vor der Cu(111)-Oberfläche. Aufbauend auf den höheren Energieverlusten bei der Streuung an Al(111) (Abb. 5.1) im Vergleich zu der an Cu(111) (Abb. 5.2) und der größeren Zerfallslänge sind die höheren Werte von S_0 für Cu(111) überraschend. Die Ursache dieser Diskrepanz ist in der Sensitivität der Fits zu suchen. Da die Projektile für beide Oberflächen die Elektronendichte im Festkörper nicht erreichen, sind auch die Aussagen über die „stopping power“ im Festkörper nicht zuverlässig. Abhilfe schafft dabei die Betrachtung der aus beiden Parametern resultierenden Bremskraft $S(z, E)$ für feste Abstände vor der Oberfläche. In Abbildung 5.5 sind die aus den Parametern von Abbildung 5.4 bestimmten Bremskräfte $S(z, E)$ für Heliumatome im Abstand von $z = 2$ a.u. und $z = 3$ a.u. dargestellt. Aufgrund des in beiden Fällen konstanten Parameters z_0 überträgt sich die Proportionalität $S_0 \sim v$ auf die „stopping power“ $S(E)$. Für gleiche Abstände vor der Oberfläche sind die das Projektil „bremsenden“ Kräfte für Aluminium größer als für Kupfer, was den Erwartungen aufgrund der höheren Elektronendichte entspricht.

Die beobachtete Proportionalität der „stopping power“ zur Geschwindigkeit bei der Streuung von Helium bestätigt die etablierte v Abhängigkeit.

5.2 Elektronenemission bei der Streuung von Heliumatomen

Im diesem Abschnitt wird auf die pro Projektil emittierte Anzahl von Elektronen eingegangen. In Abbildung 5.6 sind die Elektronenausbeuten γ als Funktion der

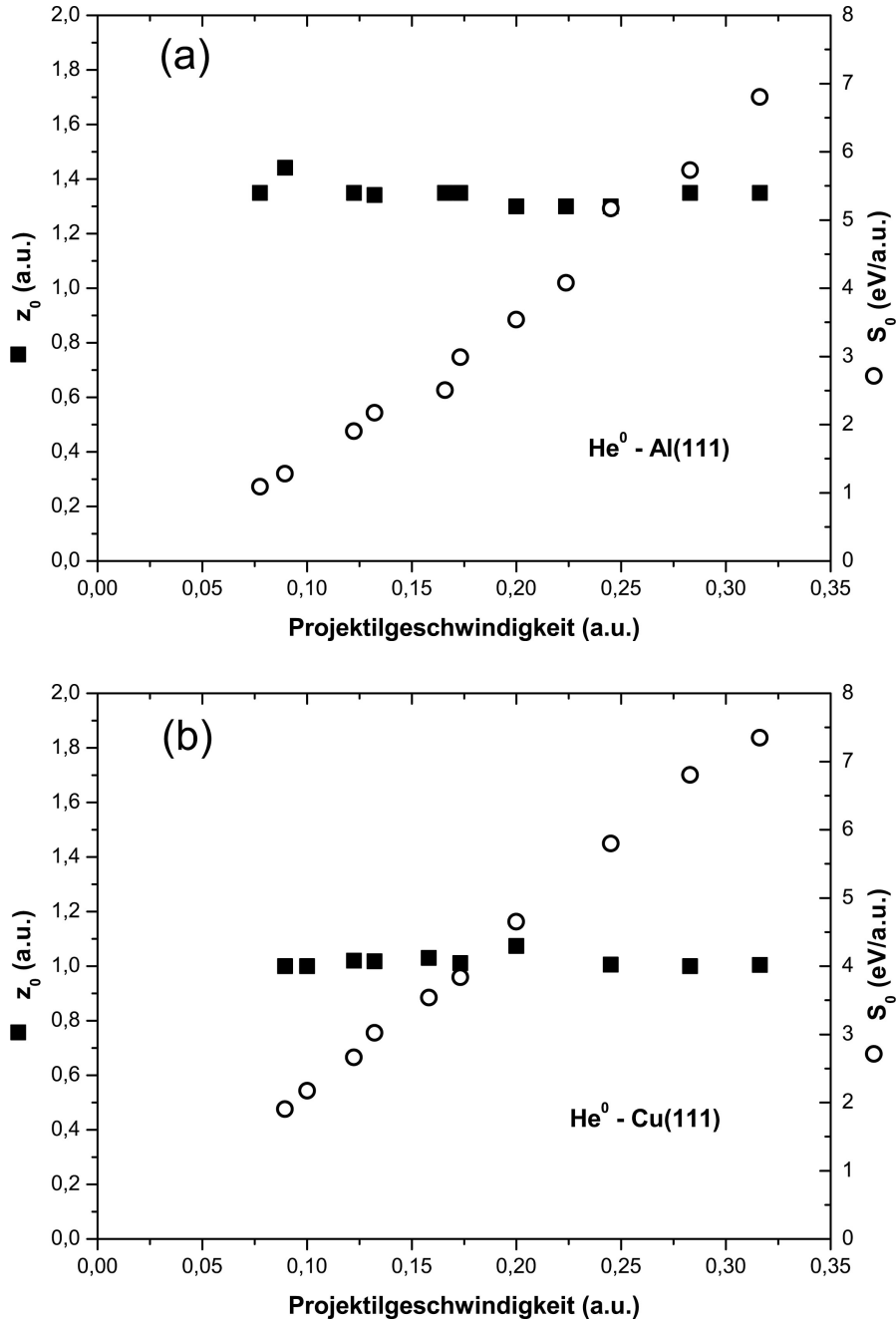


Abbildung 5.4: Parameter der „stopping power“ bei der Streuung von He^0 an (a) Al(111) und (b) Cu(111) als Funktion der Projektilgeschwindigkeit

Projektilenergie für verschiedene Einfallswinkel Φ_{in} bei der Streuung von Heliumatomen an Al(111) dargestellt. Analog zum Energieverlust (siehe Abb. 5.1) ergibt sich bei höheren Projektilenergien eine lineare Abhängigkeit der Elektronenausbeuten von E . Das Schwellenverhalten der kinetischen Elektronenemission wird in Kapitel 5.3 detailliert diskutiert. Die Abhängigkeit vom Einfallswinkel ist für γ etwas ausgeprägter als für ΔE .

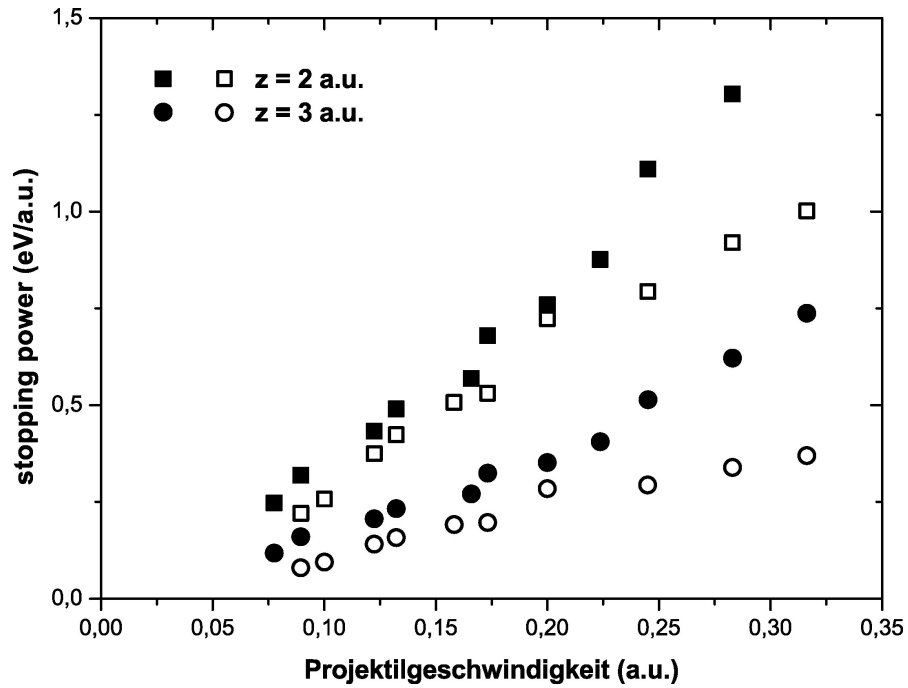


Abbildung 5.5: $S(z, E)$ als Funktion der Projektilgeschwindigkeit im Abstand von $z = 2$ a.u. (Quadrate) und 3 a.u. (Kreise) bei der Streuung von He^0 an Al(111) (volle Symbole) und Cu(111) (offene Symbole)

Ein ähnliches Bild ergibt sich bei der Betrachtung der Elektronenausbeuten für die Streuung von He^0 an Cu(111), wie sie in Abbildung 5.7 für verschiedene Einfallswinkel als Funktion der Projektilenergie dargestellt sind. Auch hier existiert eine lineare Abhängigkeit zwischen γ und E_0 , welche analog zu Al(111) erst bei höheren Energien einsetzt. Eine Abhängigkeit vom Einfallswinkel ist bei Cu(111) jedoch im Rahmen der Fehler nicht vorhanden.

Aufgrund der elektronischen Eigenschaften beider Oberflächen (Tabelle 4.1) ist bei der Streuung an Aluminium eine höhere Elektronenausbeute zu erwarten. Durch die größere Austrittsarbeit der Cu(111)-Oberfläche bei gleichzeitig geringerer Fermi-Energie müssen die Projektile mehr Energie auf Elektronen übertragen, damit jene emittiert werden. Diese einfache Anschauung wird in Abbildung 5.8, wo die Elektronenausbeuten bei der Streuung von He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 2,2^\circ$ (volle Kreise) und unter $\Phi_{in} = 3,3^\circ$ (volle Quadrate) zusammen mit denen für Cu(111) unter $\Phi_{in} = 2,6^\circ$ (offene Kreise) und $\Phi_{in} = 3,6^\circ$ (offene Quadrate) dargestellt sind, bestätigt. Ein Einfluß der projizierten Bandlücke der Cu(111)-Oberfläche tritt in diesen Darstellungen nicht hervor.

Konkrete Aussagen beim direkten Vergleich der Elektronenausbeuten der beiden Oberflächen sind jedoch aufgrund der Einflüsse der Projektiltrajektorien nicht möglich. Aus diesem Grund wird als Analogon zur „stopping power“ beim Energieverlust eine Elektronenproduktionsrate $P(z, E)$ eingeführt. Aus der Integration über die Trajektorie werden aus der Winkelabhängigkeit von γ bei konstanter

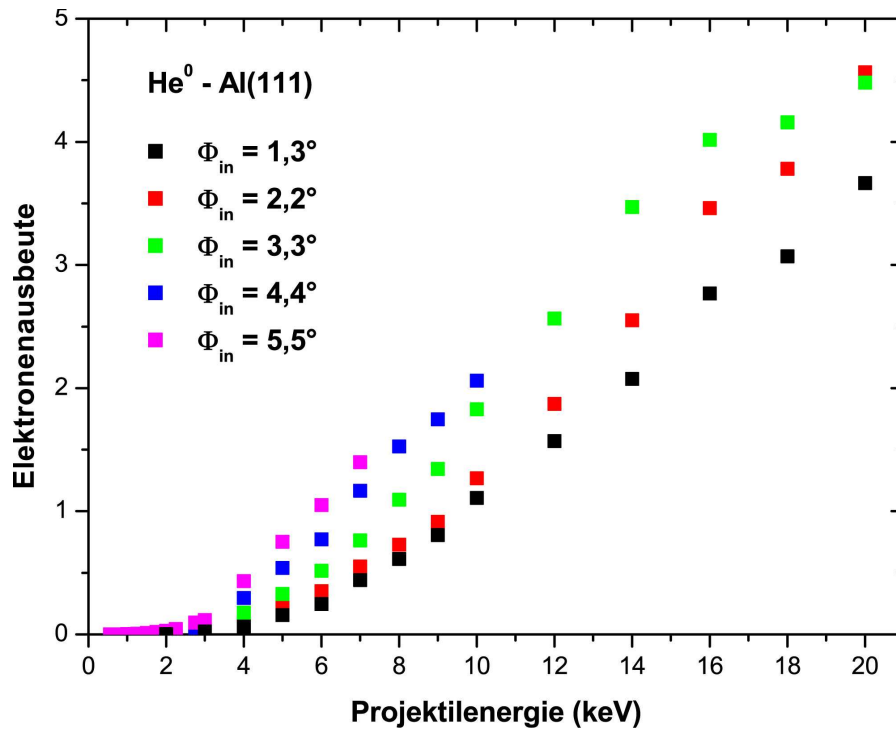


Abbildung 5.6: Elektronenausbeute bei der Streuung von He⁰ an Al(111) für verschiedene Einfallswinkel Φ_{in} als Funktion der Projektilenergie

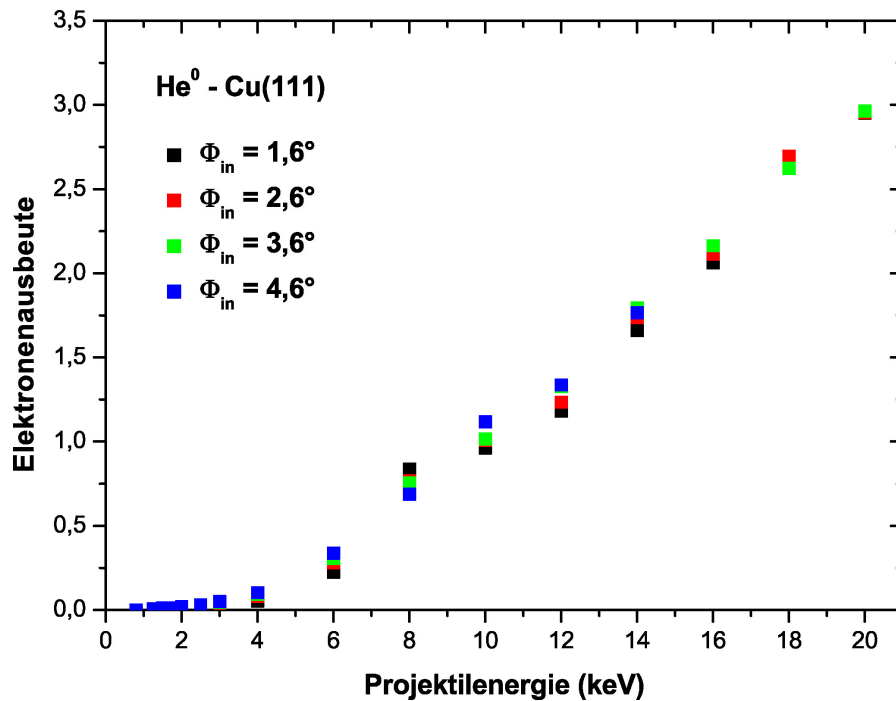


Abbildung 5.7: Elektronenausbeute bei der Streuung von He⁰ an Cu(111) für verschiedene Einfallswinkel Φ_{in} als Funktion der Projektilenergie

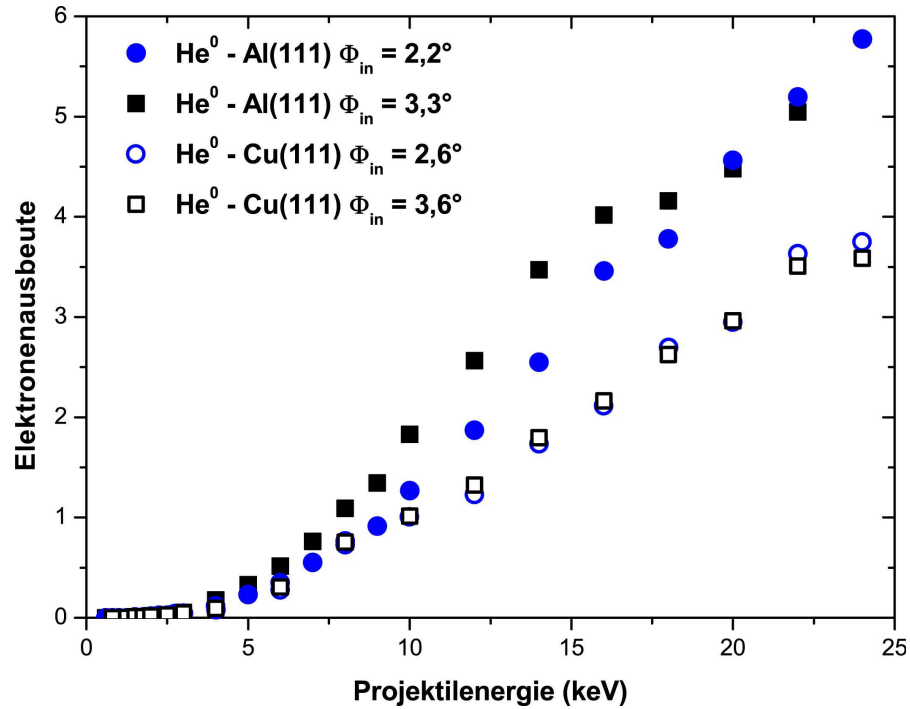


Abbildung 5.8: Elektronenausbeute bei der Streuung von He^0 an Al(111) und Cu(111) für je zwei Einfallswinkel als Funktion der Projektilenergie

Energie wiederum die Parameter $P_0(E)$ und $z_0(E)$ bestimmt.

$$\gamma(\Phi_{in}) = \int_{Traj.} P(z, E) dx = \int_{Traj.} P_0(E) \exp \left[-\frac{z}{z_0(E)} \right] dx \quad (5.6)$$

In Abbildung 5.9 sind die aus den experimentellen Daten gewonnenen Parameter der Elektronenproduktionsrate bei der Streuung von Helium an (a) Al(111) und (b) Cu(111) als Funktion der Projektilgeschwindigkeit dargestellt. Wie bei der Analyse der „stopping power“ ist für beide Oberflächen die Zerfallslänge z_0 im Rahmen der Fehler konstant. P_0 ist analog zu S_0 proportional zur Geschwindigkeit. Im Gegensatz zu S_0 setzt P_0 allerdings erst bei Geschwindigkeiten $v > 0$ a.u. ein. Dieses Verhalten deutet, wie schon die Elektronenausbeuten selber, auf die Schwelle der kinetischen Elektronenemission hin. Aufgrund der höheren Ausbeuten bei der Streuung an Al(111) sind auch die $P_0(E)$ für Aluminium größer als für Kupfer. Die Zerfallskonstanten $z_0(E)$ zeigen dagegen höhere Werte für Kupfer. Dies kann der unterschiedlichen Winkelabhängigkeit von γ bei den Oberflächen zugeschrieben werden. Die Anpassung über einen exponentiellen Abfall vor der Oberfläche stammt aus der Analogie zum Energieverlust und wurde erfolgreich bei Alkalihalogeniden ([50, 41, 23]) und Metallen ([29, 51]) bei sehr kleinen Einfallswinkeln angewendet. Die Ursache für die Emission der Elektronen bleibt dabei unberücksichtigt. Die Energieverluste zeigen (siehe Kapitel 5.1) für beide Flächen eine annähernd gleiche Abhängigkeit von Φ_{in} , welche sich auf die Elektronenausbeuten übertragen lassen sollte. Bei Cu(111) ist dies auch der Fall (Abbildung 5.7),

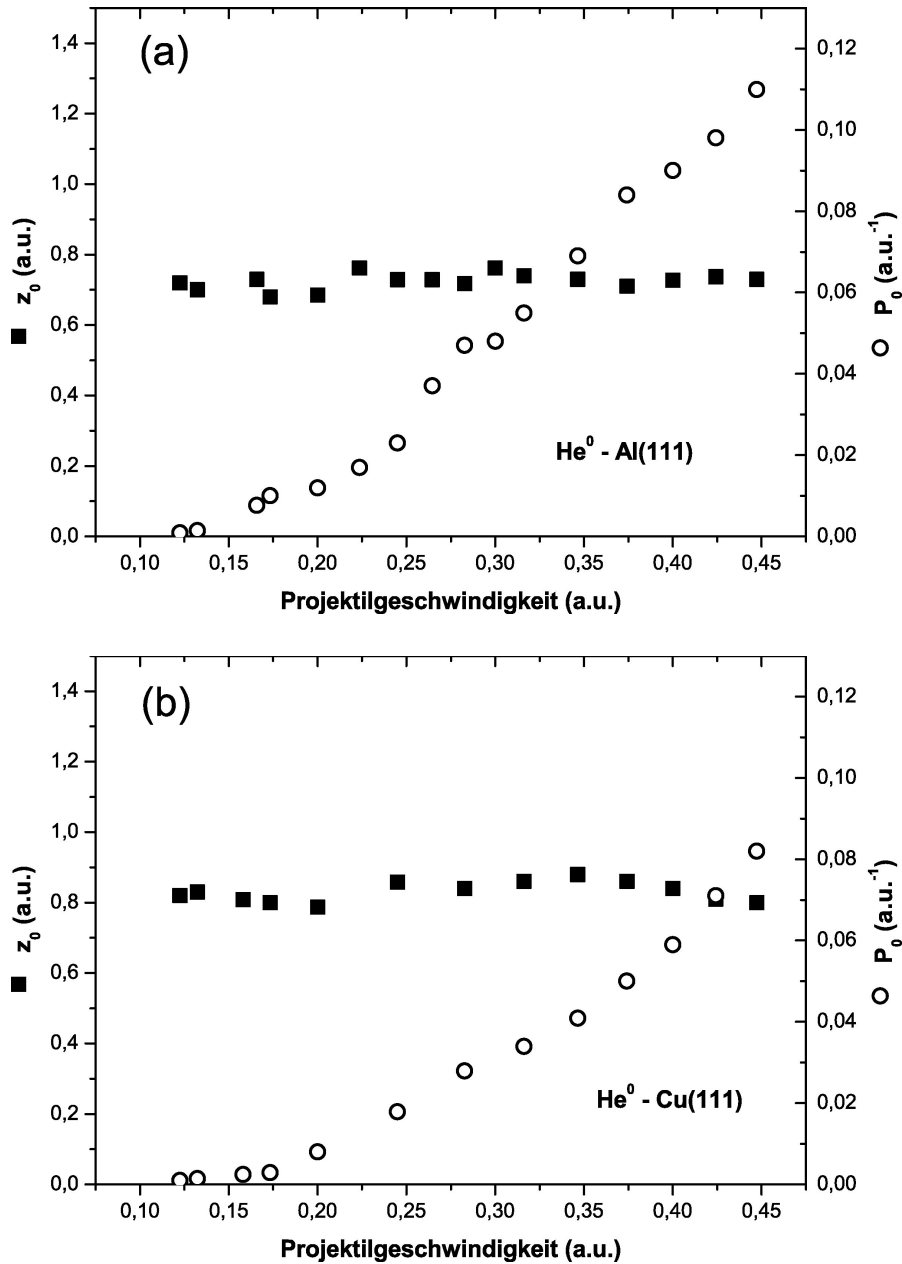


Abbildung 5.9: Parameter der Elektronenproduktionsrate bei der Streuung von He^0 an (a) $\text{Al}(111)$ und (b) $\text{Cu}(111)$ als Funktion der Projektilgeschwindigkeit

bei $\text{Al}(111)$ nicht. Im untersuchten Energie- und Winkelbereich kommen die Projektile deutlich dichter an die $\text{Al}(111)$ -Fläche heran. Bei sehr kurzen Entfernungen zwischen Projektil und Oberflächenatom können die emittierten Elektronen nicht nur aus dem Valenzband sondern auch aus gebundenen Zuständen des Projektils oder des Targets stammen (Elektronenpromotion). Dieser zusätzliche Emissionskanal weist nicht zwingend die gleiche exponentielle Abhängigkeit vom Abstand wie die reine kinetische Emission auf, sondern kann vielmehr deutlich stärker von

z abhängen, was eine Erklärung für die Reduktion der Zerfallslänge z_0 wäre. Einen weiteren Hinweis auf veränderte Emissionsmechanismen bietet der direkte Vergleich der Zerfallslängen für die „stopping power“ und für $P(z, E)$. Bei der Cu(111) Oberfläche unterscheiden sich beide Werte um weniger als 20 % wohingegen bei Aluminium z_0^S fast doppelt so groß wie z_0^P ist.

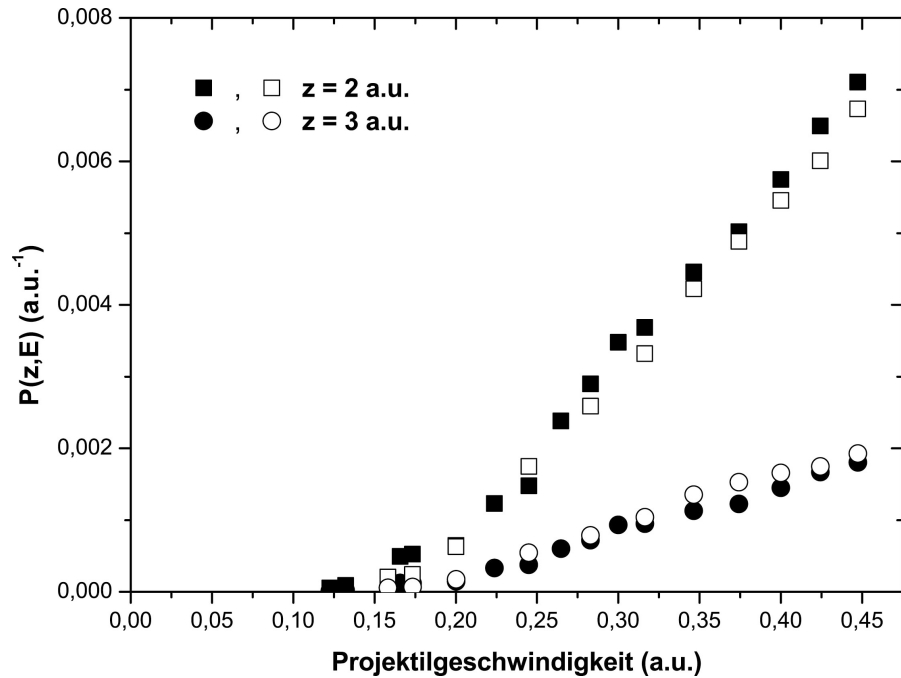


Abbildung 5.10: $P(z, E)$ als Funktion der Projektilgeschwindigkeit im Abstand von $z = 2$ a.u. (Quadrate) und 3 a.u. (Kreise) bei der Streuung von He^0 an Al(111) (volle Symbole) und Cu(111) (offene Symbole)

Um den Vergleich der Elektronenproduktionsraten für die Oberflächen zu komplettieren, ist in Abbildung 5.10 $P(z, E)$ für Al(111) (volle Symbole) und Cu(111) (offene Symbole) für zwei feste Abstände z als Funktion der Projektilgeschwindigkeit aufgetragen. Für Geschwindigkeiten oberhalb des in Kapitel 5.3 diskutierten Schwellenbereichs sind trotz unterschiedlicher Elektronenausbeuten die Elektronenproduktionsraten bei gleichem Abstand vergleichbar.

5.3 Schwellenverhalten der kinetischen Elektronenemission

Nach den Untersuchungen von Energieverlust und Elektronenemission soll nun auf das Schwellenverhalten der kinetischen Elektronenemission eingegangen werden.

5.3.1 Modell

Die kinetische Elektronenemission ist bei einem freien Elektronengas das Resultat einer binären Wechselwirkung zwischen dem geschirmten Coulomb-Potential des Projektils und einem einzelnen Elektron [52, 53, 54]. Im Folgenden wird ein Modell, basierend auf einem klassischen binären Stoß zwischen dem Projektil mit dem Impuls $\bar{p}_p = m_p(v_{p\parallel}, v_{p\perp})$ und einem freien Elektron mit dem Impuls $\bar{p}_e = m_e(v_{\parallel}, v_{\perp})$, zur Beschreibung dieser Wechselwirkung erläutert. Aus der Erfüllung von Energie- und Impulserhaltung folgt für einen zentralen Stoß, bei dem sich das Elektron mit dem Ausgangsimpuls $\bar{p}_e = m_e(-v_{\parallel}, v_{\perp})$ auf das Projektil mit $\bar{p}_p = m_p(v_{p\parallel}, 0)$ zu bewegt (maximaler Energieübertrag), unter der Berücksichtigung von $m_p \gg m_e$ für den Endimpuls des Elektrons \bar{p}_{fin}

$$\bar{p}_{fin} = 2m_e\bar{v}_p + \bar{p}_e \quad . \quad (5.7)$$

Die Änderung des Elektronenimpulses ist demnach eine Spiegelung des Ausgangsimpulses senkrecht zur Ausbreitungsrichtung des Projektils plus dem Impulsübertrag $\bar{q} = 2m_e\bar{v}_p$ durch das Projektil. Aus dieser Impulsrelation folgt für den maximalen Energieübertrag E' vom Projektil mit der Energie E_p und der Masse m_p auf ein Elektron (E_e)

$$E' = 4 \frac{E_p}{m_p} \left(1 + \sqrt{\frac{m_p E_e}{E_p}} \right) \quad . \quad (5.8)$$

In einem Freien-Elektronengas-Metall folgt die Zustandsdichte der Elektronen der Fermi-Statistik. Alle Zustände bis zur Fermi-Energie E_F sind besetzt. Aus der klassischen Energie-Impuls-Relation resultiert für den Fermi-Impuls $k_F = \sqrt{E_F/2m_e}$. Die Verteilung der Elektronen läßt sich im Impulsraum durch die Fermi-Kugel mit Radius k_F und konstanter Dichte veranschaulichen (Abb. 5.11). In dieser Abbildung entspricht die ursprüngliche Fermi-Kugel der Kugel im Koordinatenursprung. Die Elektronenimpulse \bar{k}_e und \bar{k}_{fin} sind rot dargestellt und der Impulsübertrag durch das Projektil (\bar{q}) gelb. Die Wechselwirkung zwischen Projektil und Elektron resultiert in diesem Bild in der Spiegelung des Elektronenausgangsimpulses \bar{k}_e an der k_{\perp} -Achse bei gleichzeitiger Verschiebung des Mittelpunktes um $\bar{q} = 2m_e\bar{v}_p$.

Damit Elektronenemission bei der Streuung von Atomen am Festkörper auftreten kann, muß der Energieübertrag vom Projektil auf ein Elektron mindestens der Austrittsarbeit W entsprechen. Der Energieübertrag ist am höchsten, wenn ein Fermi-Elektron sich zum Projektil entgegengesetzt bewegt. Daraus resultiert ein minimaler Impulsübertrag q_{th} , der die Energiebeziehung in Gleichung 5.9 erfüllen muß.

$$\frac{\bar{k}_{fin}^2}{2} = \frac{(k_F + q_{th})^2}{2} = E_F + W \quad (5.9)$$

Aus Gleichung 5.9 und der Relation $q_{th} = 2m_e v_{th}$ ergibt sich die Schwellengeschwindigkeit v_{th} des Projektils für kinetische Elektronenemission [52].

$$v_{th} = \frac{k_F}{2} \left(\sqrt{\frac{W}{E_F} + 1} - 1 \right) \quad (5.10)$$

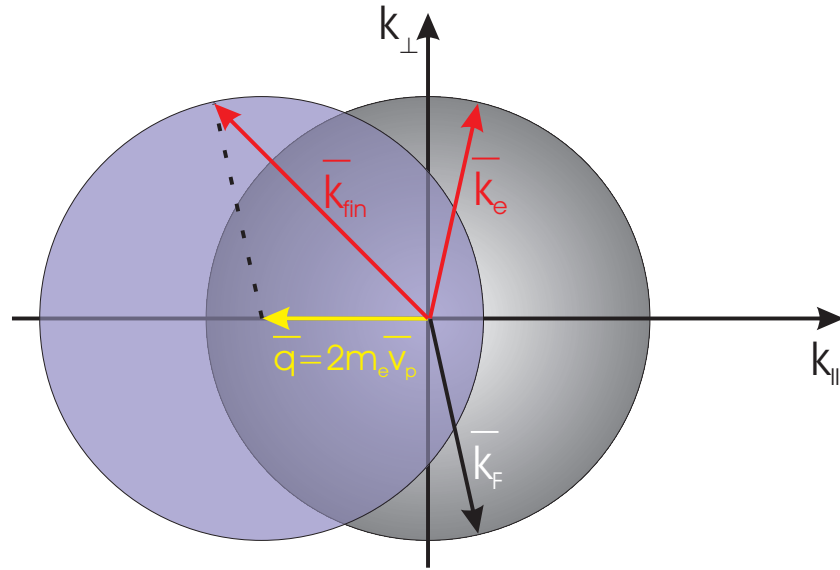


Abbildung 5.11: Prinzip der verschobenen Fermi-Kugel beim binären Elektron-Atom-Stoß; Elektronenimpulse rot, Impulsübertrag durch das Projektil gelb (Details siehe Text)

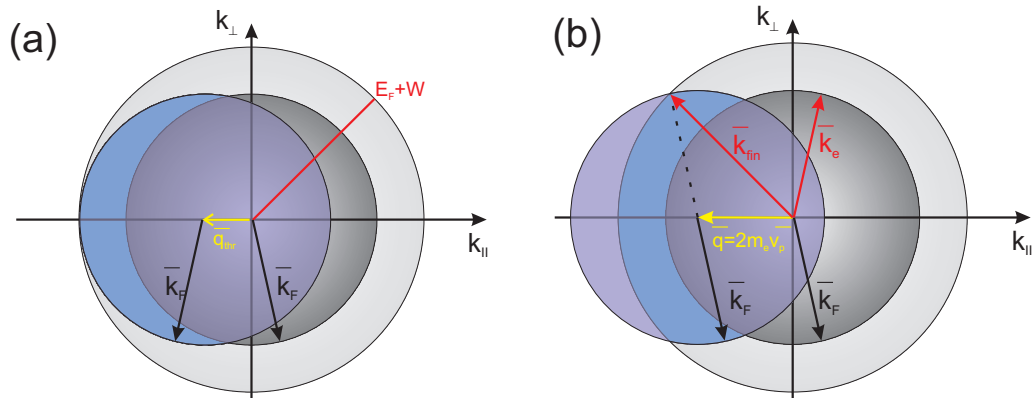


Abbildung 5.12: Flächenprojektion verschobener Fermi-Kugeln für (a) $v_p = v_{th}$ und (b) $v_p > v_{th}$ (Details siehe Text)

Daraus folgen mit den Daten aus Tabelle 4.1 für die untersuchten Oberflächen die theoretischen Schwellengeschwindigkeiten in Tabelle 5.1.

Oberfläche	v_{th} (a.u.)
Al(110)	0,081
Al(111)	0,082
Cu(111)	0,101

Tabelle 5.1: Theoretische Schwellengeschwindigkeiten für kinetische Elektronenemission

In Abbildung 5.12 (a) ist die Schwelle der kinetischen Elektronenemission skiz-

ziert. Die Ausgangsfermiskugel K_F wird durch \bar{q}_{th} so weit verschoben, dass sie den Rand der Kugel K_V mit Radius $E_F + W$ berührt. Die Schnittmenge $K_V \setminus K_F \cap K_V$ repräsentiert unbesetzte Zustände des Leitungsbandes.

$$K_F = \left\{ \bar{k} \mid |\bar{k}| \leq k_F \right\}; \quad V_F = \frac{4\pi}{3} k_F^3 \quad (5.11)$$

$$K_V = \left\{ \bar{k} \mid |\bar{k}| \leq k_F + q_{th} \right\}; \quad V_V = \frac{4\pi}{3} (k_F + q_{th})^3 \quad (5.12)$$

In der Beschreibung der kinetischen Elektronenemission über das binäre Stoßmodell und das Modell der verschobenen Fermi-Kugeln werden Elektronentransport und Elektron-Elektron-Wechselwirkungen vernachlässigt. Trotzdem lassen diese Modellvorstellungen weitere Rückschlüsse auf die Elektronenemission zu.

Für Projektilgeschwindigkeiten $v > v_{th}$ existiert ein endliches Volumen V der verschobenen Kugel, für das gilt $k_{fin}^2/2 > (W + E_F)$. Mit Hilfe dieses Phasenraumvolumens (siehe Abb. 5.12 (b)) läßt sich die Abhängigkeit der Elektronenausbeute von der Projektilgeschwindigkeit an der Schwelle bestimmen. Unter Verwendung der Substitution $u = (q - q_{th})/q_{th}$ resultiert V zu [54]

$$V = \pi q_{th} \left(k_F (q_{th} + k_F) u^2 - \left(k_F (q_{th} + k_F) + \frac{q_{th}^2}{3} \right) u^3 + O(u^4) \right). \quad (5.13)$$

Durch das Fehlen eines linearen Terms in Gleichung 5.13 folgt für V an der Schwelle der kinetischen Elektronenemission eine quadratische Abhängigkeit von $(q - q_{th})^2$. Zu bemerken bleibt, dass das Modell den eigentlichen Emissionsprozess vernachlässigt und damit nur Aussagen über den funktionalen Zusammenhang zwischen γ und q zuläßt. Absolute Elektronenausbeuten können damit nach klassischen Argumenten von Puff [55] allerdings nicht angegeben werden. Elektronen können nur dann emittiert werden, wenn ihre Energie senkrecht zu Oberfläche größer als das Potential $W + E_F$ ist. Unter der Annahme einer isotropen Richtungsverteilung der Elektronen folgt, dass nur Elektronen innerhalb eines Kegels mit dem Öffnungswinkel Θ_K den Festkörper verlassen können.

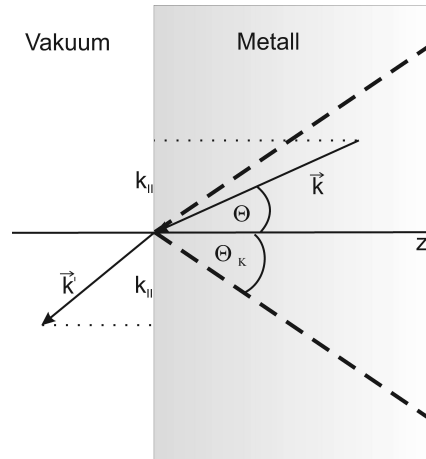


Abbildung 5.13: Skizze zum Austrittskegel von Elektronen

$$\Theta_K = \cos^{-1} \sqrt{\frac{E_F + W}{E_F + W + E_{ke}}} \quad (5.14)$$

E_{ke} entspricht dabei der kinetischen Energie der Elektronen und Θ_K bezieht sich auf die Oberflächennormale (siehe Abbildung 5.13). Für kinetische Elektronenenergien unter 1 eV, was an der Schwelle zur KE anzunehmen ist, folgt damit eine

Emissionswahrscheinlichkeit P_{em} (Gl. 5.15) von nur einigen Prozent.

$$P_{em} = \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{\frac{E_F + W}{E_F + W + E_{ke}}} \right) \quad (5.15)$$

Trotz dieser Einschränkungen gestattet das beschriebene Modell weitere Abschät-

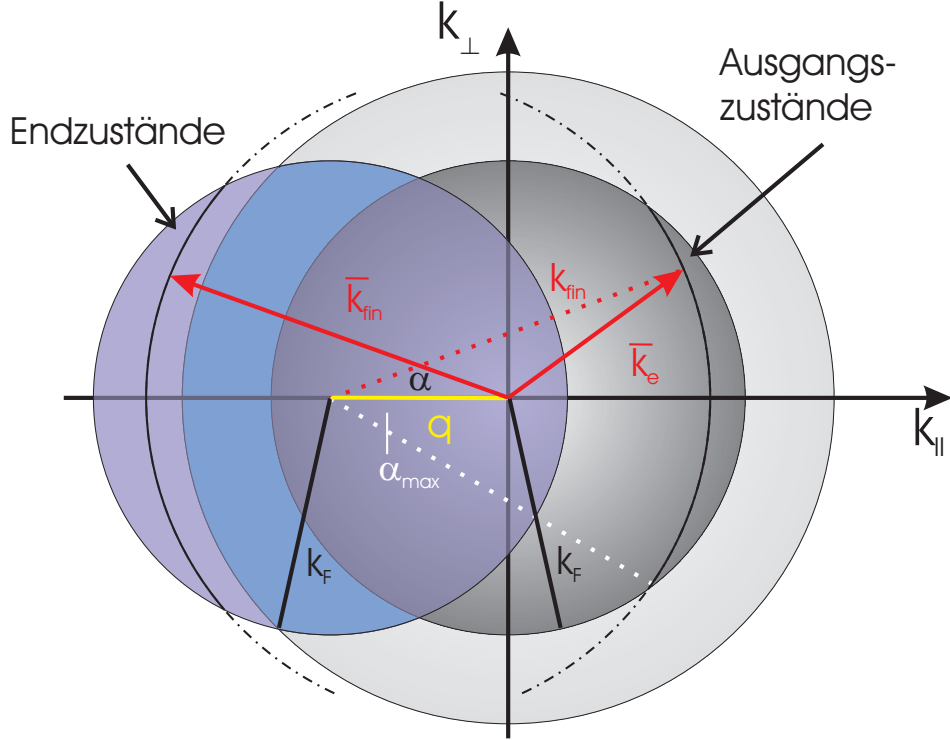


Abbildung 5.14: Flächenprojektion verschobener Fermi-Kugeln für $v_p > v_{th}$ zur Beschreibung des mittleren Energieübertrags vom Projektil auf emittierte Elektronen; Farbgebung wie in Abbildung 5.11 (Details siehe Text)

zungen. Setzt man spezifische Elektronenenergien in Relation zu den dazugehörigen Phasenraumvolumina, kann der mittlere Energieübertrag vom Projektil auf emittierte Elektronen bestimmt werden. Im Experiment entspricht dieser Übertrag der Energiedifferenz zwischen den Spektren benachbarter Elektronenzahlen. Im Modell kann dieser Energietransfer (ΔE_{em}) aus der Differenz der mittleren Ausgangs- und Endzustandsenergien ($\Delta E_{em} = \langle E_{fin} \rangle - \langle E_{in} \rangle$) bestimmt werden.

$$\langle E_{in} \rangle = \frac{\int_{k_{fin} \in K_3 \setminus K_3 \cap K_4} \frac{k_e^2}{2} d^3 k_{fin}}{\int_{k_{fin} \in K_3 \setminus K_3 \cap K_4} d^3 k_{fin}} \quad (5.16)$$

$$\langle E_{fin} \rangle = \frac{\int_{k_{fin} \in K_V \setminus K_F \cap K_V} \frac{k_{fin}^2}{2} d^3 k_{fin}}{\int_{k_{fin} \in K_V \setminus K_F \cap K_V} d^3 k_{fin}} \quad (5.17)$$

Aus Abbildung 5.14 resultiert der geometrische Zusammenhang zwischen k_e und k_{fin} zu:

$$k_e^2 = k_{fin}^2 + q^2 - 2k_{fin}q \cos \alpha , \quad (5.18)$$

wobei $\cos \alpha_{max} = (k_{fin}^2 + q^2 - k_F^2)/(2qk_{fin})$ gilt. Die Definitionen der Phasenraumzustandsmengen K_3 und K_4 sind den Gleichungen 5.19 und 5.20 zu entnehmen.

$$K_3 = \left\{ \bar{k} \mid |\bar{k}| \leq k_F \right\} ; \quad V_3 = \frac{4\pi}{3} k_F^3 \quad (5.19)$$

$$K_4 = \left\{ \bar{k} + \bar{q} \mid |\bar{k}| \leq k_F + q_{th} \right\} ; \quad V_4 = \frac{4\pi}{3} (k_F + q_{th})^3 \quad (5.20)$$

Abschließend zu der Beschreibung des Modells sei erwähnt, dass nur zentrale Stöße mit maximalem Energieübertrag in die bisherigen klassischen Betrachtungen eingegangen sind. Quantenmechanisch werden Streuungen von Elektronen an Atomen mit der Schrödinger-Gleichung beschrieben.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (5.21)$$

Das gestreute Teilchen wird dabei als ebene Welle $\Psi(\vec{r})$ dargestellt, und das Streuzentrum wird durch das Potential $V(r)$ repräsentiert.

Aus der Streutheorie folgt der in Gleichung 5.22 dargestellte Ausdruck für den differentiellen Wirkungsquerschnitt.

$$\frac{d\sigma(\Theta)}{d\Omega} = |f(\Theta)|^2 \quad (5.22)$$

Dabei sind Θ der Streu-, Ω der Raumwinkel und $f(\Theta)$ die Streuamplitude, welche sämtliche Informationen über den Streuprozess enthält. Aufgrund der Symmetrie des Streuprozesses und der Möglichkeit ebene Wellen durch Kugelflächenfunktionen darzustellen, läßt sich die Streuamplitude in Partialwellen zerlegen. Die Streuamplitude mit den Drehimpulsquantenzahlen l , den Streuphasen δ_l für die jeweilige Partialwelle und den Legendre-Polynomen $P_l(x)$ wird dann beschrieben [56, 57] durch

$$f(\Theta) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) (\exp[2i\delta_l] - 1) P_l(\cos \Theta) \quad (5.23)$$

Die Streuphasen sind charakteristisch für den jeweiligen Streuprozess und hängen vom Elektronenimpuls k ab. Der totale Wirkungsquerschnitt σ resultiert aus der Integration des differentiellen Wirkungsquerschnitts über den Raumwinkel Ω .

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l \quad (5.24)$$

Sind die δ_l bekannt und konvergiert die Summe nach wenigen l , lassen sich über Gleichung 5.22 der differentielle und über Gleichung 5.24 der totale Wirkungsquerschnitt berechnen. In Abbildung 5.15 ist der differentielle Wirkungsquerschnitt als

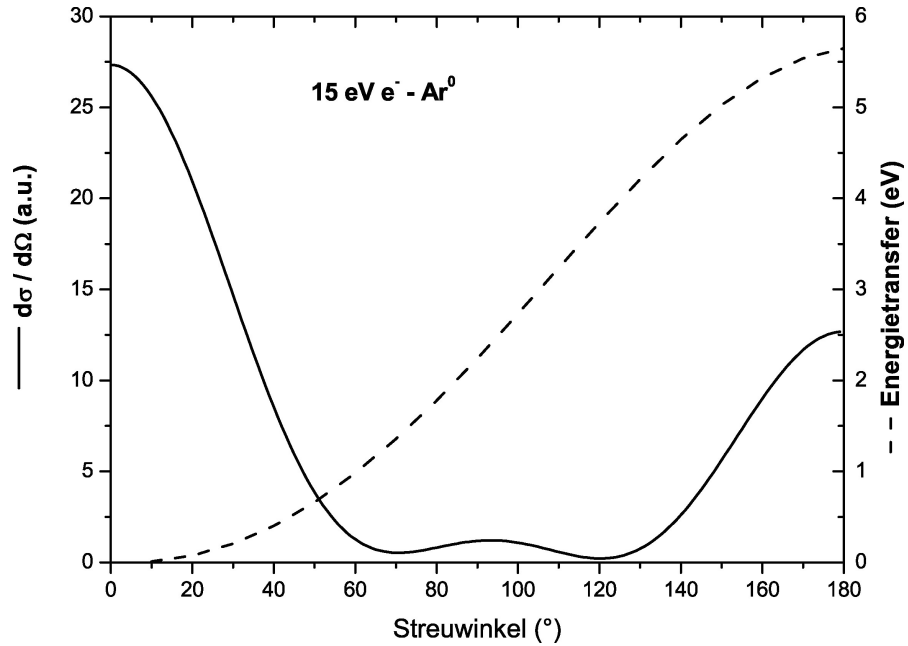


Abbildung 5.15: Differentieller Streuquerschnitt und Energietransfer auf das Elektron als Funktion des Streuwinkels bei der Streuung von 15 eV Elektronen an Argon

Funktion des Streuwinkels bei der Streuung von 15 eV Elektronen an Argonatomen dargestellt. Für die Berechnung der Streuamplitude wurden die ersten drei Streuphasen aus [58] verwendet. Deutlich zu erkennen ist die Erhöhung des Wirkungsquerschnittes für kleine und große Streuwinkel. Elektronen werden entweder kaum abgelenkt oder reflektiert (klassischer zentraler Stoß). Zusätzlich ist in Abbildung 5.15 die auf das Elektron übertragene Energie in Abhängigkeit vom Streuwinkel aufgetragen. Die Streuungen unter kleinem Winkel führen zu sehr geringem Energieübertrag. Erst im Bereich großer Θ kommt es sowohl zu merklichem Energietransfer als auch zu hohen Streuquerschnitten. Die bis hierhin vorausgesetzte Annahme von zentralen Stößen zwischen Projektil und Elektron im Bereich der Schwelle läßt sich damit quantenmechanisch stützen.

5.3.2 Experimentelle Untersuchungen zum Schwellenverhalten der kinetischen Elektronenemission

Zur Überprüfung der theoretischen Betrachtungen zur kinetischen Schwelle der Elektronenemission wurden Experimente in diesem Regime durchgeführt. In Abbildung 5.16 sind die Quadratwurzeln der Elektronenausbeuten bei der Streuung von Helium an Al(111) exemplarisch für Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 2,2^\circ$ und $\Phi_{in} = 5,5^\circ$ als Funktion der Projektilgeschwindigkeit dargestellt. Diese Darstellung wurde in Anlehnung an Experimente zur Photoemission nahe der Schwelle gewählt, da dabei zur Bestimmung der Austrittsarbeit von Metallen der „Fowler-Plot“ verwendet

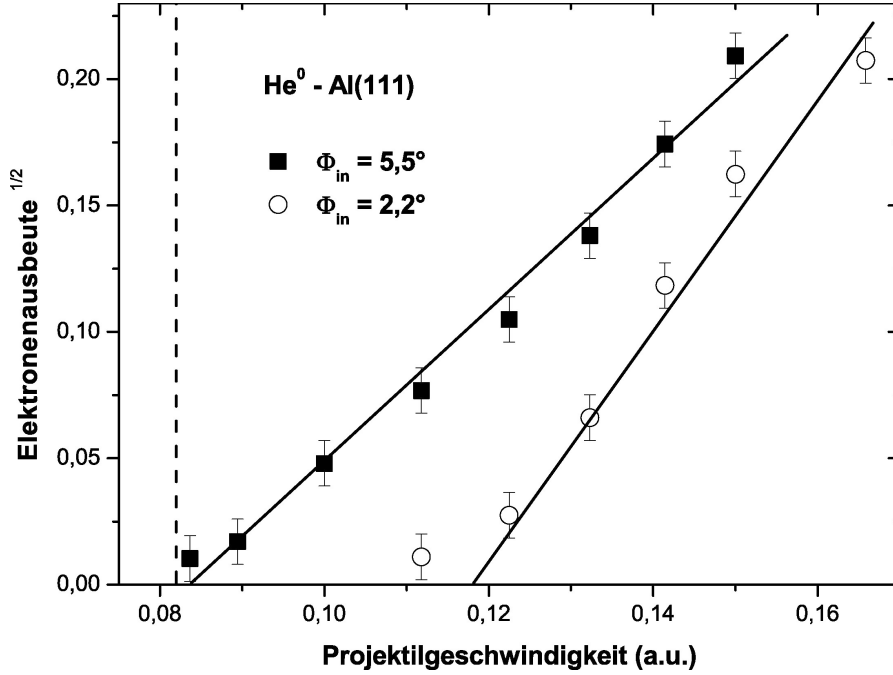


Abbildung 5.16: Quadratwurzeln der Elektronenausbeuten an der Schwelle der kinetischen Elektronenemission bei der Streuung von He^0 an $\text{Al}(111)$ unter $\Phi_{in} = 5,5^\circ$ (volle Quadrate) und $\Phi_{in} = 2,2^\circ$ (offene Kreise); Linien: beste Anpassung durch Gleichung 5.25

wird [59]. Zur Extraktion der Schwellengeschwindigkeiten wurden die Elektronenausbeuten im Bereich der Schwelle, unter Zugrundelegung der quadratischen Abhängigkeit in Gleichung 5.13, durch Gleichung 5.25 angepaßt.

$$\sqrt{\gamma} = A + B \cdot v \quad (5.25)$$

Die Schwellengeschwindigkeit v_{th} ergibt sich dann aus $-B/A$. Zusätzlich ist in die Abbildung die theoretische Schwelle als gestrichelte vertikale Linie eingezeichnet. Deutlich zu erkennen ist die gute Anpassung und damit die vom Modell prognostizierte quadratische Abhängigkeit der Ausbeuten von der Projektilgeschwindigkeit. Für $\Phi_{in} = 5,5^\circ$ resultiert aus dem Fit eine Schwellengeschwindigkeit von $v_{th}(5,5^\circ) = (0,084 \pm 0,002)$ a.u. und für $\Phi_{in} = 2,2^\circ$ ergibt sich $v_{th}(2,2^\circ) = (0,12 \pm 0,002)$ a.u.. Beide Werte liegen über der theoretischen Schwelle von $v_{th}^{theo} = 0,082$ a.u.. Die Differenz zur Theorie nimmt mit flacherem Einfallswinkel zu. In Tabelle 5.2 sind die aus den Experimenten bestimmten Schwellengeschwindigkeiten für verschiedene Einfallswinkel dargestellt, wobei sich bestätigt, dass v_{th} mit flacher werdendem Winkel ansteigt. In Abbildung 5.17 sind analog zu Aluminium exemplarisch für die Einfallswinkel $\Phi_{in} = 4,6^\circ$ und $\Phi_{in} = 2,6^\circ$ die Quadratwurzeln der Elektronenausbeuten an der Schwelle zusammen mit den Anpassungen über Gleichung 5.25 und der theoretischen Schwellengeschwindigkeit (vertikale Linie) dargestellt. Auch diese experimentellen Befunde bestätigen den quadratischen Zusammenhang zwischen der Elektronenausbeute γ und der Pro-

Φ_{in}	v_{th} (a.u.)
1,9°	$0,133 \pm 0,003$
2,2°	$0,120 \pm 0,002$
3,3°	$0,108 \pm 0,006$
4,4°	$0,088 \pm 0,002$
5,5°	$0,084 \pm 0,002$

Tabelle 5.2: Experimentelle Schwellengeschwindigkeiten für das System He^0 -Al(111)

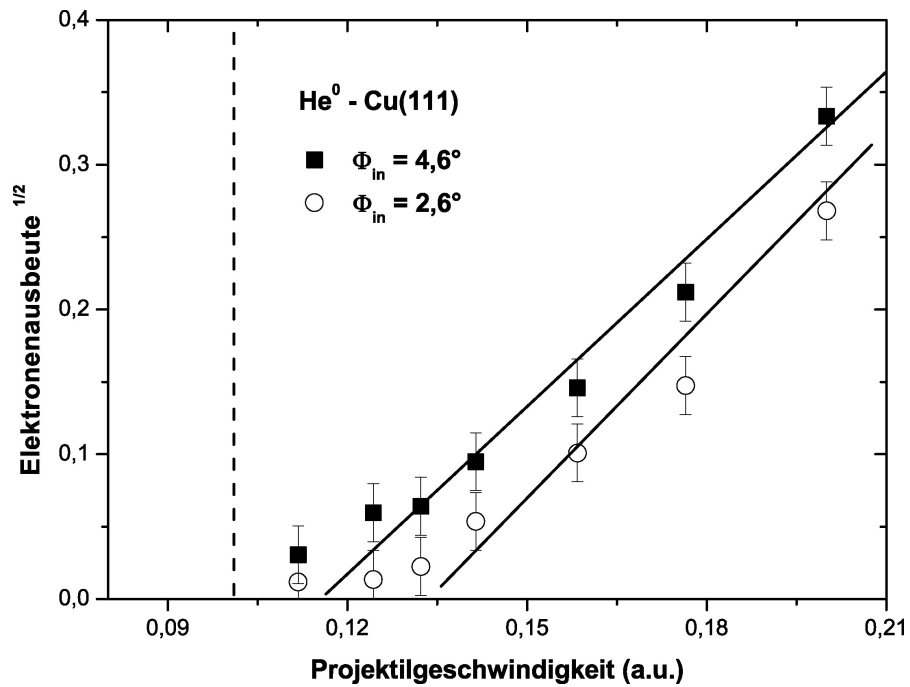


Abbildung 5.17: Quadratwurzeln der Elektronenausbeuten an der Schwelle der kinetischen Elektronenemission bei der Streuung von He^0 an Cu(111) unter $\Phi_{in} = 4,6^\circ$ (volle Quadrate) und $\Phi_{in} = 2,6^\circ$ (offene Kreise); Linien: beste Anpassung durch Gleichung 5.25

jektilgeschwindigkeit v . Wie bei der Streuung an Al(111) liegen die experimentell bestimmten Schwellengeschwindigkeiten, die in Tabelle 5.3 zusammengestellt sind, über dem theoretischen Wert aus Tabelle 5.1 und steigen mit abnehmenden Einfallswinkel an. Die Diskrepanz zwischen dem theoretischen Wert und den experimentellen Ergebnissen ist damit zu erklären, dass in die Theorie die aus der Elektronendichte im Festkörper resultierende Fermi-Energie der Elektronen eingeht. Bei der streifenden Streuung dringen die Projektile aber nicht bis in diese Bereiche vor. Durch die Streuung oberhalb der Oberfläche durchfliegen die Projektile Bereiche mit Elektronendichten kleiner als im Festkörper. Dadurch sind auch die Energien und die Impulse der Elektronen, mit denen die Atome wechselwirken, kleiner als die Fermi-Energie. Durch diese geringeren Elektronenimpulse verringert sich der

Φ_{in}	v_{th} (a.u.)
1,6°	0,14±0,01
2,6°	0,135±0,007
3,6°	0,122±0,006
4,6°	0,116±0,005

Tabelle 5.3: Experimentelle Schwellengeschwindigkeiten für das System He⁰-Cu(111)

Energieübertrag während des Stoßes auf das beteiligte Elektron. Da für die Emission eines Elektrons Gleichung 5.9 erfüllt sein muß, ist eine Erhöhung der Projektilgeschwindigkeit notwendig, um genügend Energie an die Elektronen abzugeben. Zur Veranschaulichung ist in Abbildung 5.18 der Verlauf der Elektronendichten für Al(111) (schwarze Kurve) und Cu(111) (blaue Kurve) vor der Oberfläche dargestellt.

Die schraffierten Regionen unterhalb der Kurven repräsentieren die Abstandsbereiche für den jeweils größten und kleinsten Einfallswinkel bei den jeweiligen Schwellengeschwindigkeiten. Der Abbildung ist zu entnehmen, dass die Heliumatome für beide Kristalle an der kinetischen Schwelle nicht die Elektronendichte im Festkörper erreichen.

Die Elektronenausbeuten in den Abbildungen 5.16 und 5.17, die unterhalb der ermittelten Schwellengeschwindigkeiten auftreten, resultieren aus Streuungen an Oberflächenstörungen (Stufenkanten). Bei derartigen Streuprozessen dringen die Projektile in Bereiche höherer Elektronendichte vor, was bis zum Erreichen des Volumenwertes führen kann. Diese Ausbeuten haben aber mit den zu untersuchenden Bereichen der streifenden Streuung nichts zu tun.

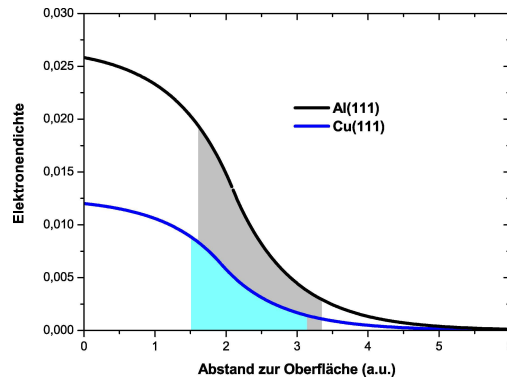


Abbildung 5.18: Verlauf der Elektronendichten für Al(111) und Cu(111) [60]

Eine weitere Vorhersage des Modells der binären Stöße für die Schwelle der kinetischen Elektronenemission ist der mittlere Energietransfer auf emittierte Elektronen. Durch die Projektion von Ereignissen, die verbunden mit bestimmten Elektronenzahlen sind, auf die Energieverlustachse läßt sich dieser Energietransfer aus den experimentellen Daten bestimmen. In Abbildung 5.19 ist dies für die Streuung von 12 keV He⁰ an Al(111) unter $\Phi_{in} = 2,2^\circ$ demonstriert. Zur besseren Verdeutlichung wurden die Energieverlustspektren der entsprechenden Elektronenzahlen normiert. Je höher die Elektronenzahl ist, desto größer ist die Verschiebung der Spektren zu höheren Energieverlusten. In Teil (b) der Abbildung ist diese Verschiebung pro emittierter Elektronenzahl zusammen mit der theoretischen Vorhersage

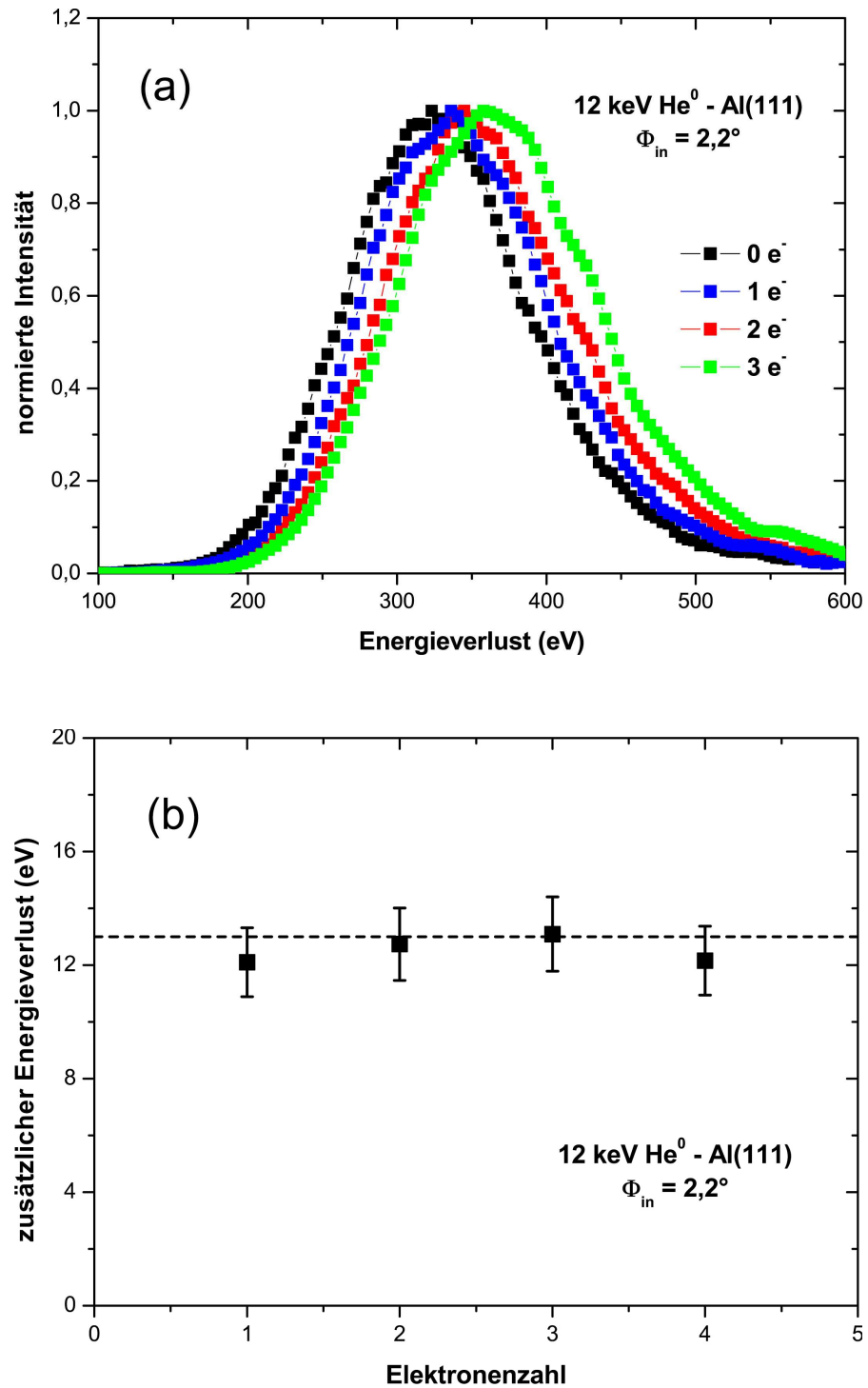


Abbildung 5.19: Normierte Energieverlustspektren für einzelne Elektronenzahlen (a) und zusätzlicher Energieverlust als Funktion der Elektronenzahl (b) bei der Streuung von 12 keV He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 2,2^\circ$; Die horizontale Linie in Grafik (b) repräsentiert die Vorhersage durch das Modell.

dargestellt. Als Referenz der Verschiebung dient der Energieverlust der nächst kleineren Elektronenzahl. Im Rahmen der Fehler ist die Übereinstimmung zwischen Modell und Experiment gut. Durch die Konstanz der pro Elektron zusätzlichen Energieverluste wird die Behandlung der kinetischen Elektronenemission als Folge unabhängiger Ereignisse gerechtfertigt, in denen die Elektronen direkt emittiert werden. Für den Fall, dass höhere Elektronenzahlen durch Elektron-Elektron-Wechselwirkungen entstehen, muß die Verschiebung gegen Null gehen, da die Emission eines zusätzlichen Elektrons dann unabhängig vom Projektil wäre.

In Abbildung 5.20 sind die Energieverluste pro emittiertem Elektron als Funktion der Projektilenergie bei der Streuung von He^0 an (a) Al(111) und (b) Cu(111) für verschiedene Einfallswinkel Φ_{in} dargestellt. Die schwarze Kurve repräsentiert den maximal möglichen Energietransfer ΔE_{max} auf ein Fermi-Elektron nach Gleichung 5.8, die blaue Kurve den mittleren Energieübertrag auf der Basis des Modells für die Schwelle ($\Delta E_{em} = \langle E_{fin} \rangle - \langle E_{in} \rangle$ mit $\langle E_{in} \rangle$ aus Gl. 5.16 und $\langle E_{fin} \rangle$ aus Gl. 5.17). Da es sich bei ΔE_{em} um eine Mittelung basierend auf Phasenraumbetrachtungen handelt, liegen diese Werte unterhalb von ΔE_{max} . Für beide Oberflächen werden die experimentellen Daten im Bereich der Schwelle durch ΔE_{em} und ΔE_{max} gut wiedergegeben. Erhöht sich die Projektilenergie unterschätzt die Theorie (ΔE_{em}) das Experiment. Eine mögliche Erklärung für die im Vergleich zur Theorie höheren Energieverluste pro Elektron ist die Vernachlässigung des Elektronentransports und des eigentlichen Emissionsprozesses. Durch inelastische Wechselwirkungen mit anderen Elektronen oder Streuung an Oberflächenatomen werden die Elektronen, die nach dem Stoß mit dem Projektil gerade die Bedingung $E_{fin} \geq E_F + E$ erfüllen, nicht emittiert. Das Modell berücksichtigt dies nicht, wodurch die experimentellen Daten über dem Mittelwert ΔE_{em} liegen. Anders sieht es beim Vergleich der Daten mit ΔE_{max} aus. Auch hier liegen die experimentellen Werte bei höheren Projektilenergien über dem theoretischen Wert. Mit größer werdendem Einfallswinkel verschieben sich die Schnittpunkte zwischen Experiment und Theorie zu kleineren Energien. Dieses Resultat läßt sich nicht über fehlende Betrachtungen im Emissionsprozess und Elektronentransport erklären, da die Projektile in einem Stoß nicht in der Lage sind, solche Energiebeträge auf die emittierten Elektronen zu übertragen. Betrachtet man die Senkrechtenergie der Projektile, ab der die Daten zu hohe Werte annehmen, fällt auf, dass bei der Al(111)-Oberfläche diese für alle Einfallswinkel ca. 35 eV beträgt. Dabei kommen die Heliumatome ca. 0,25 a.u. an die Oberfläche heran. Bei derartig geringen Abständen können Elektronen durch Stöße mit Atomen der Oberfläche aus gebundenen Zuständen der Stoßpartner ausgelöst werden (Elektronenpromotion [61, 62], Kap. 6.1). Bei der Untersuchung der Cu(111)-Oberfläche ergibt sich ein analoges Bild. Hier liegt die Senkrechtenergie, ab der das Experiment ΔE_{max} überschreitet, bei ca. 90 eV, was einer Annäherung an die Oberfläche von ca. 0,2 a.u. entspricht. Somit kann die Diskrepanz ebenfalls mit der Elektronenpromotion begründet werden.

Die Beschreibung der Schwelle der kinetischen Elektronenemission durch das Modell aus Kapitel 5.3.1 bleibt trotz der in Abbildung 5.20 beobachteten Unterschiede,

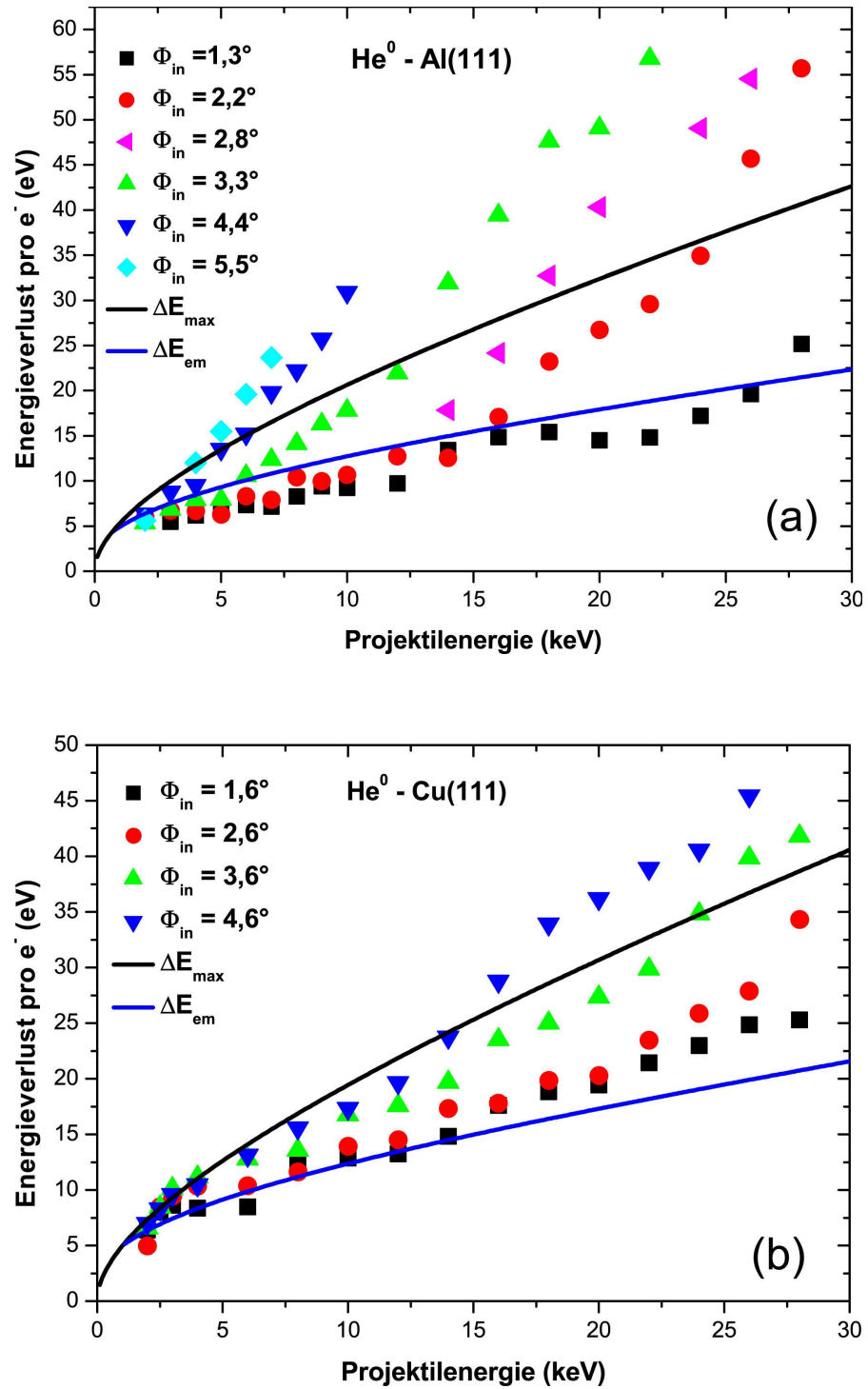


Abbildung 5.20: Energieverlust pro Elektron als Funktion der Projektilenergie für verschiedene Φ_{in} , Vorhersage des binären Modells ΔE_{tr} (blaue Kurve) und maximaler Energietransfer im zentralen Stoß ΔE_{max} (schwarze Kurve) bei der Streuung von He⁰ an (a) Al(111) und (b) Cu(111)

die durch das Auftreten von Elektronenpromotion verursacht werden, unbeeinflusst. Für beide Oberflächen ist die Möglichkeit der Promotion erst ab einer Energie von $E > 4$ keV und damit $v > 0,2$ a.u. gegeben. Die Ermittlung der Schwellengeschwindigkeiten, die in den Tabellen 5.2 und 5.3 angegeben wurden, erfolgte aber für Geschwindigkeiten $v \leq 0,2$ a.u., sodass es sich dabei um reine Stöße zwischen Projektil und Valenzelektronen handelt.

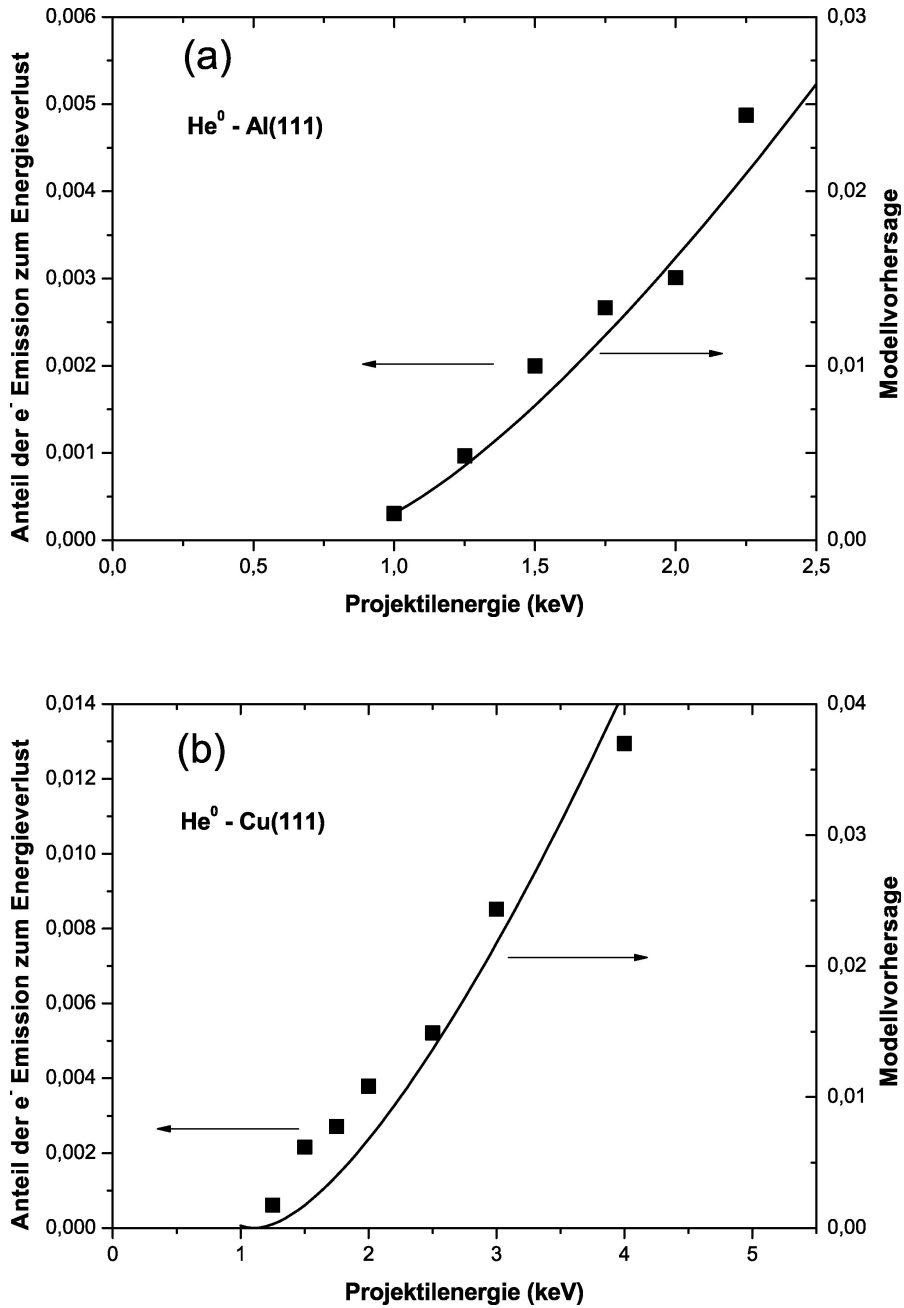


Abbildung 5.21: Anteil der Elektronenemission am Energieverlust bei der Streuung von He⁰ an (a) Al(111) unter $\Phi_{in} = 5,5^\circ$ und (b) Cu(111) unter $\Phi_{in} = 4,6^\circ$ zusammen mit der Vorhersage durch das Modell

In Abbildung 5.21 ist der Anteil der Elektronenemission am gesamten Energieverlust ($\Delta E_{em} \cdot \gamma / \Delta E$) bei der Streuung von He^0 an (a) Al(111) unter $\Phi_{in} = 5, 5^\circ$ und (b) Cu(111) unter $\Phi_{in} = 4, 6^\circ$ als Funktion der Projektilenergie dargestellt. Zusätzlich ist in den Grafiken die Vorhersage durch das Modell für die beiden Systeme enthalten. Diese wurde durch Integration der Elektronenenergien über die Phasenraumvolumina der Ausgangs- und Endzustände für Anregungen innerhalb des Festkörpers ($k_F \leq k$, $k_{fin} \leq k_F + q_{th}$) und ins Vakuum ($k_F + q_{th} \leq k_{fin} = k_F + q$) [54] gewonnen. Die Auswertung erfolgte in diesem Fall nur für den größten untersuchten Einfallswinkel, um die Einflüsse von Stufenkanten und dem Abfall der Elektronendichte vor der Oberfläche zu reduzieren. Für beide Oberflächen wird der Trend der experimentellen Daten gut durch die theoretische Vorhersage wiedergegeben. Die absoluten Werte überschätzt das Modell sowohl für Al(111) als auch für Cu(111), obwohl die eigentliche Vorhersage durch die Emissionswahrscheinlichkeit nach Gleichung 5.14 [55] korrigiert wurde. Die Ursache dafür ist die Vernachlässigung des Elektronentransports in der Beschreibung durch das Prinzip der verschobenen Fermi-Kugeln.

Zusammenfassend läßt sich sagen, dass das in Kapitel 5.3.1 vorgestellte Modell zur Beschreibung der Schwelle der kinetischen Elektronenemission trotz seiner Einfachheit die experimentellen Daten gut beschreibt. So zeigen insbesondere die experimentellen Elektronenausbeuten die vom Modell prognostizierte quadratische Abhängigkeit von der Projektilgeschwindigkeit. Die Tendenzen anderer Parameter wie der Energieübertrag auf emittierte Elektronen und der Anteil der Elektronenemission am gesamten Energieverlust werden ebenfalls durch die Experimente bestätigt. Für die präzise Vorhersage der experimentellen Daten reicht die einfache Beschreibung jedoch nicht aus. Dies konnte aufgrund der Vernachlässigungen von Elektronentransport, Emissionsprozess und Überwindung der Oberflächen-Barriere durch angeregte Elektronen auch nicht erwartet werden. Durch die Berücksichtigung der experimentellen Gegebenheiten der streifenden Streuung konnten die Abweichungen der Schwellengeschwindigkeiten (Tabelle 5.2 und 5.3) von den theoretischen Werten des Festkörpers (Tabelle 5.1) erklärt werden.

5.3.3 Bestimmung von Fermi-Impulsen vor Metalloberflächen

Im vorherigen Kapitel wurde gezeigt, dass die experimentell bestimmten Schwellengeschwindigkeiten v_{th} über dem theoretischen Wert liegen, der sich aus der Elektronendichte im Festkörper ergibt. Dies wurde darauf zurückgeführt, dass die Projektile aufgrund der streifenden Streugeometrie nicht in die Bereiche der Elektronendichte innerhalb des Festkörpers vordringen. In diesem Abschnitt wird dieses Phänomen ausgenutzt, die Fermi-Impulse der Elektronen vor der Oberfläche zu bestimmen.

In Abbildung 5.22 ist der Verlauf des Oberflächenpotentials $V(z)$ und damit der Elektronenenergie als Funktion des Abstandes zur Oberfläche z skizziert. Wie in

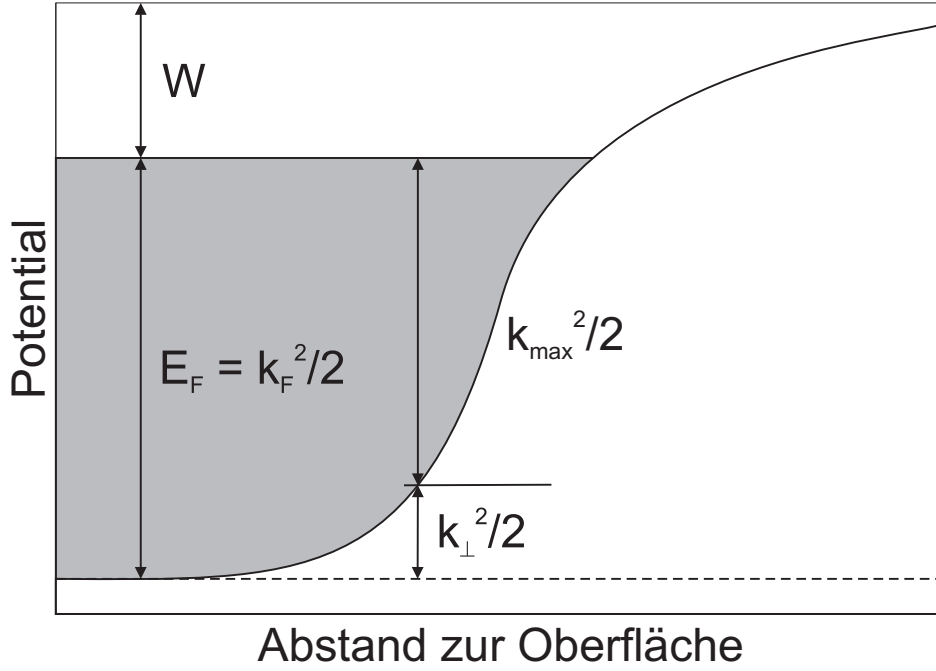


Abbildung 5.22: Schematischer Verlauf von Elektronenenergie und Oberflächenpotential vor Metalloberflächen

der Abbildung angedeutet, nähert sich $V(z)$, ausgehend vom Wert im Festkörper ($V_{FK} = -(W + E_F) = -(W + k_F^2/2)$), für steigende Abstände dem klassischen Bildladungspotential $V_{im} = -1/(4(z - z_{im}))$, wobei z_{im} die Lage der Bildladungsebene repräsentiert. Der Anstieg von $V(z)$ wird durch elektrostatische und Austausch- bzw. Wechselwirkungsanteile bestimmt [63]. Zahlreiche Berechnungen von $V(z)$ wurden mit Hilfe der lokalen und der nicht lokalen Dichte-Funktional-Theorie durchgeführt (z.B. [64, 65, 66, 67, 68]).

Die Schwellengeschwindigkeiten der kinetischen Elektronenemission sind durch die Elektronenimpulse vor der Oberfläche und insbesondere vom maximalen Elektronenimpuls k_{max} bestimmt. Für das Volumen gilt $k_{max} = k_F$, wohingegen bei Abständen $z > 0$ zur Oberfläche k_{max} durch das effektive Oberflächenpotential fixiert wird (siehe Abb. 5.22).

$$k_{max}^2 = k_F^2 - k_{\perp}^2 \quad (5.26)$$

Wie in Kapitel 5.3.1 erläutert wurde, kann kinetische Elektronenemission erst ab einer Schwellengeschwindigkeit des Projektils v_{th} einsetzen, was, um die Bedingung $E_{fin} \geq E_F + W$ zu erfüllen, in einer Elektronenenergie nach der Wechselwirkung von $E_{fin} = (2\bar{v}_{th} - \bar{k})^2/2$ resultiert. Aus diesen beiden Zusammenhängen lässt sich mittels der experimentell bestimmten Schwellengeschwindigkeit der maximale Elektronenimpuls k_{max} in einem Abstand z zur Oberfläche berechnen.

$$k_{max} = \frac{W - 2v_{th}^2}{2v_{th}} \quad (5.27)$$

Der Abstand z resultiert aus der Senkrechterenergie des Projektils an der Schwelle

und dem Wechselwirkungspotential zwischen Projektil und Oberfläche.

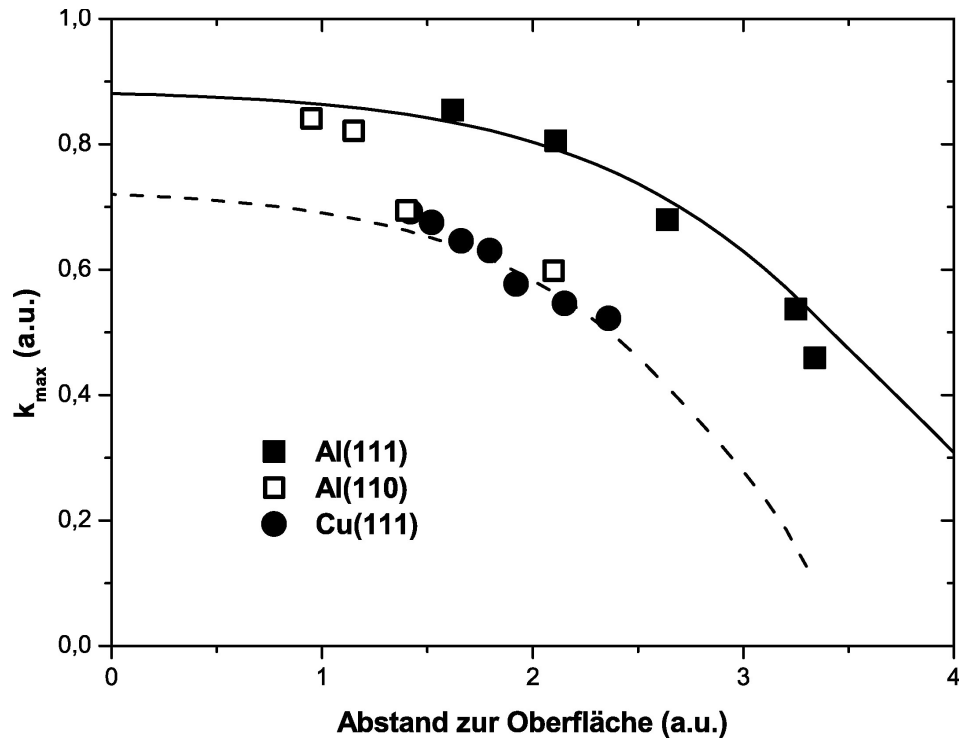


Abbildung 5.23: Maximale Elektronenimpulse als Funktion des Abstandes zur Oberfläche für die Streuung von He^0 an Al(110), Al(111) und Cu(111)

In Abbildung 5.23 sind die so ermittelten k_{\max} für die Streuung von Helium an Al(111) (volle Quadrate) und Cu(111) (volle Kreise) als Funktion des Abstandes zur Oberfläche dargestellt. Für Kupfer wurden zusätzlich zu den Daten aus Kapitel 5.3.2 Experimente bei konstanten Senkrechterenergien von 3 eV, 5 eV, 7 eV und 10 eV durchgeführt und ausgewertet. Die Impulse k_{\max} zeigen für beide Oberflächen das aus Abbildung 5.22 erwartete Abfallen zu größer werdenden Abständen. Bei Verringerung des Abstandes zur Oberfläche nähern sie sich dem Wert für das Volumen des Festkörpers. Die Linien repräsentieren k_{\max} für Al(111) und Cu(111) aus der Berechnung des Oberflächenpotentials. Die experimentellen Daten spiegeln die Vorhersagen aus dem Potential gut wider. Anzumerken bleibt, dass es sich bei der experimentellen Bestimmung von k_{\max} nur um einen Effektivwert handelt. Dies liegt an der vorausgesetzten Schärfe der Impulsverteilung in einem festen Abstand zur Oberfläche. In Kapitel 6.2 wird jedoch gezeigt, dass diese Schärfe insbesondere bei der Al(111)-Oberfläche nicht gegeben ist. Trotzdem liefert die hier demonstrierte Methode gute Übereinstimmung mit den Vorhersagen. Die geringeren Impulse für Cu(111) im Vergleich zu Al(111) sind in der geringeren Elektronendichte im Festkörper und damit einer geringeren Fermi-Energie begründet.

Zur Demonstration der Sensitivität der verwendeten Methode zur Bestimmung der Impulse vor der Oberfläche wurden Experimente zur Streuung von He^0 an Al(110) durchgeführt. Die elektronischen Eigenschaften im Festkörper sind für beide Alu-

miniumoberflächen gleich. Im Bereich der Oberfläche unterscheiden sie sich jedoch durch unterschiedliche Elektronendichten und damit Elektronenimpulsen. Um den Abstand zur Oberfläche schon während der Experimente zu fixieren wurden die Messungen analog zu Cu(111) bei konstanter Senkrechterenergie durchgeführt. Die Ergebnisse für die Streuung von He^0 bei Senkrechterenergien von 3 eV, 5,1 eV, 6,6 eV und 8 eV werden in Abbildung 5.23 durch die offenen Symbole repräsentiert. Der in Bezug zu Al(111) mit steigendem Abstand schnellere Abfall von k_{max} für die Al(110)-Oberfläche zeigt die zu erwartende Verschiebung der „jellium“-Kante. Durch diese Verschiebung und die damit verbundene Änderung im Abfall der Elektronendichte sollte sich die Impulsverteilung verändern, was mit Abbildung 5.23 bestätigt wird.

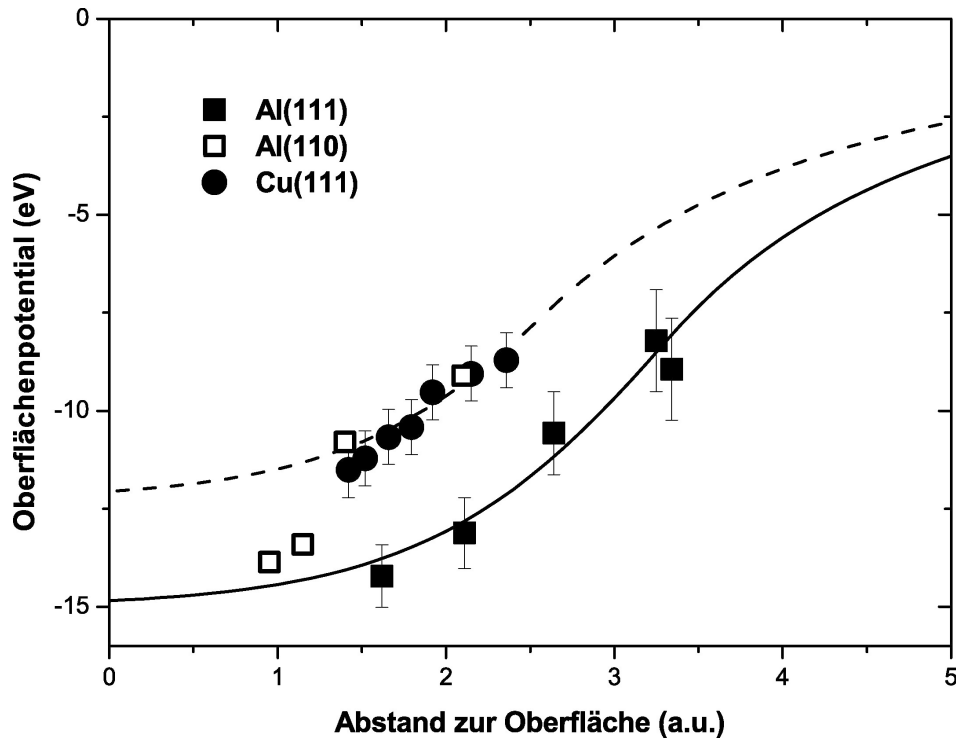


Abbildung 5.24: Effektives Oberflächenpotential der Elektronen als Funktion des Abstandes zur Oberfläche für Al(110), Al(111) und Cu(111)

In Abbildung 5.24 sind die aus den Impulsen k_{max} bestimmten effektiven Oberflächenpotentiale für Al(111) (volle Quadrate), Al(110) (offene Quadrate) und Cu(111) (volle Kreise) als Funktion des Abstandes zur Oberfläche dargestellt. Die Kurven entsprechen den Oberflächenpotentialen für Al(111) und Cu(111), welche aus Analysen von LEED-Fein-Strukturen stammen [69, 70]. Die Grundlage dieser Berechnung bildet eine Parametrisierung der Oberflächen-Barriere von Jennings

et al. [71].

$$V(z) = \begin{cases} \frac{1 - \exp[\lambda(z - z_{im})]}{2(z - z_{im})} & : z < z_{im} \\ \frac{-V_0}{A \exp[-B(z - z_{im})] + 1} & : z \geq z_{im} \end{cases} \quad (5.28)$$

Dabei gilt $A = -1 + 2V_0/\lambda$ und $B = V_0/A$. Basierend auf den drei Parametern V_0 , z_{im} und λ lässt sich das Potential als Funktion von z berechnen. V_0 ist das Potential im Inneren des Festkörpers und z_{im} die Lage der Bildladungsebene. Der Parameter λ beschreibt den Abfall des Potentials und spiegelt den Wert des Potentials an der Bildladungsebene wider ($V(z_{im}) = -\lambda/2$) [71]. Für die Rechnungen in Abbildung 5.24 wurden für Al(111) $V_0 = 0,55$ a.u., $z_{im} = 3,3$ a.u. und $\lambda = 1,2$ a.u. und für Cu(111) $V_0 = 0,45$ a.u., $z_{im} = 2,6$ a.u. und $\lambda = 1,1$ a.u. (nach Jones et al. [69]) als Parameter verwendet. Für beide Oberflächen werden die theoretischen Potentiale gut durch die experimentell bestimmten Werte wiedergegeben.

Kapitel 6

Untersuchungen zur Streuung von Neon- und Argonatomen

In den vorherigen Kapiteln wurde auf die Elektronenemission bei der Streuung von Heliumatomen eingegangen. Das folgende Kapitel befaßt sich mit der Wechselwirkung der im Bezug auf Helium nächst schwereren Edelgase Neon und Argon.

6.1 Elektronenpromotion bei der Streuung von Neon

In Abbildung 6.1 (a) ist der Energieverlust bei der Streuung von Ne^0 an Cu(111) und an Al(111) (b) als Funktion der Projektilenergie dargestellt. Während der Energieverlust bei der Wechselwirkung mit der Cu(111)-Oberfläche annähernd linear mit steigender Projektilenergie zunimmt, sind bei Al(111) sprunghafte Anstiege für Einfallswinkel $\Phi_{in} > 1,3^\circ$ zu erkennen. Mit größer werdendem Winkel verschiebt sich dieser Sprung zu geringeren Projektilenergien. Ein analoges Verhalten zeigt sich bei der Untersuchung der Elektronenausbeuten. Die pro Projektil emittierte Anzahl von Elektronen steigt bei Cu(111) (Abb. 6.2 (a)) annähernd linear mit steigender Projektilenergie an. Bei der Wechselwirkung der Neonprojekte mit der Al(111)-Oberfläche (Abb. 6.2 (b)) ist ein deutlicher Anstieg der Elektronenausbeuten für Senkrechtenergien $E_\perp > 25$ eV zu erkennen. Zur Verdeutlichung dieses Effektes wurden bei der Streuung an Al(111) für $E_\perp > 25$ eV volle und für $E_\perp < 25$ eV offene Symbole gewählt.

Das unterschiedliche Verhalten der Elektronenemission (und damit des Energieverlustes) bei der Streuung von Ne^0 an Al(111) für Senkrechtenergien kleiner bzw. größer 25 eV läßt sich auf unterschiedliche Mechanismen der Elektronenemission in den jeweiligen Regimes zurückführen. Diese Mechanismen lassen sich mit TOF-Spektren näher untersuchen. In Abbildung 6.3 sind die koinzidenten Energieverlustspektren für die Emission von keinem und einem Elektron bei der Streuung von 16 keV Neon an Al(111) unter einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 2,2^\circ$ ($E_\perp = 23,6$

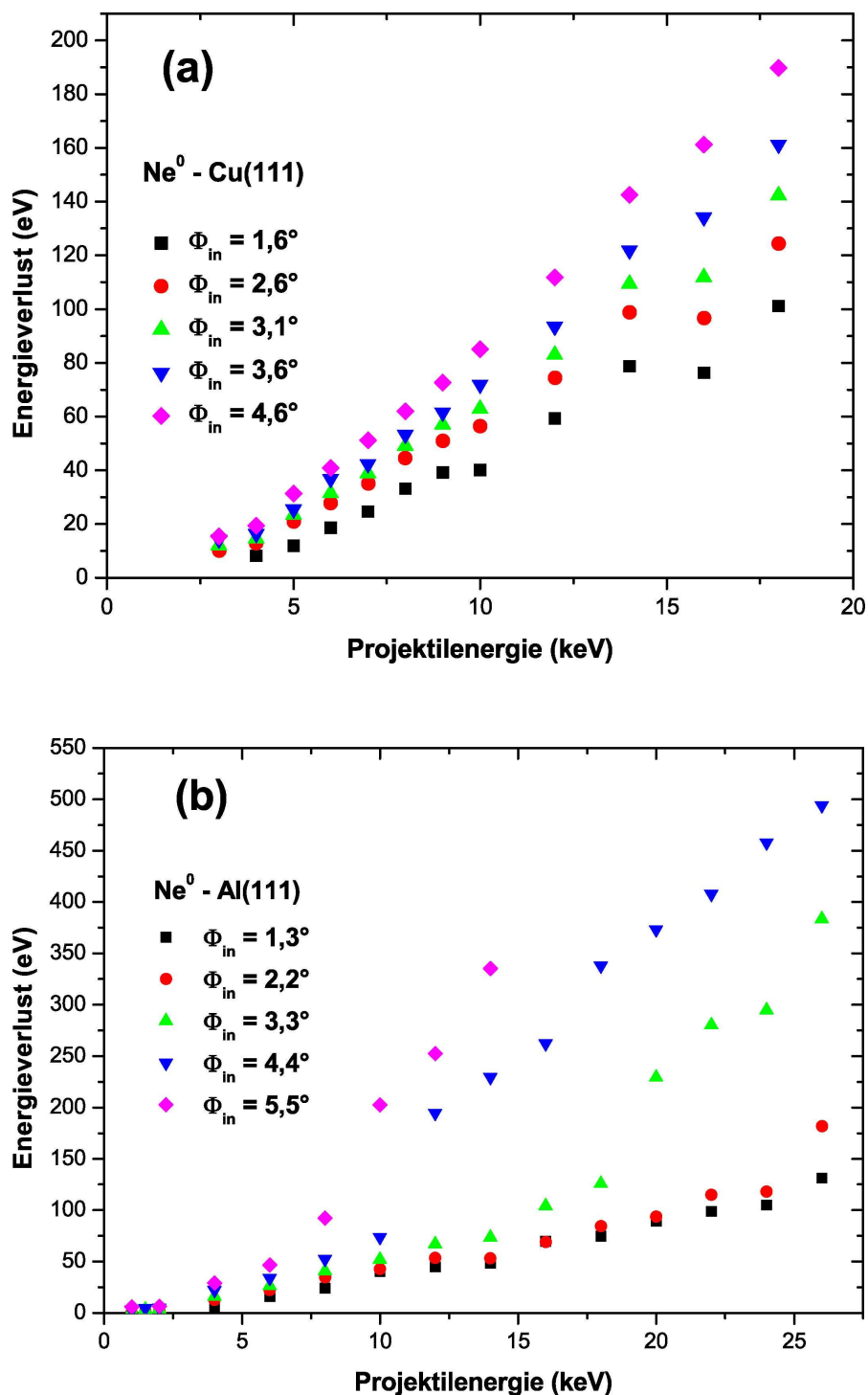


Abbildung 6.1: Energieverlust als Funktion der Projektilenergie für verschiedene Einfallswinkel Φ_{in} bei der Streuung von Ne⁰ an (a) Cu(111) und (b) Al(111)

eV) dargestellt. Beide Kurven zeigen die schon von der Streuung von He⁰ bekannte Form einer Gaußkurve. Der Unterschied im Energieverlust zwischen den Atomen

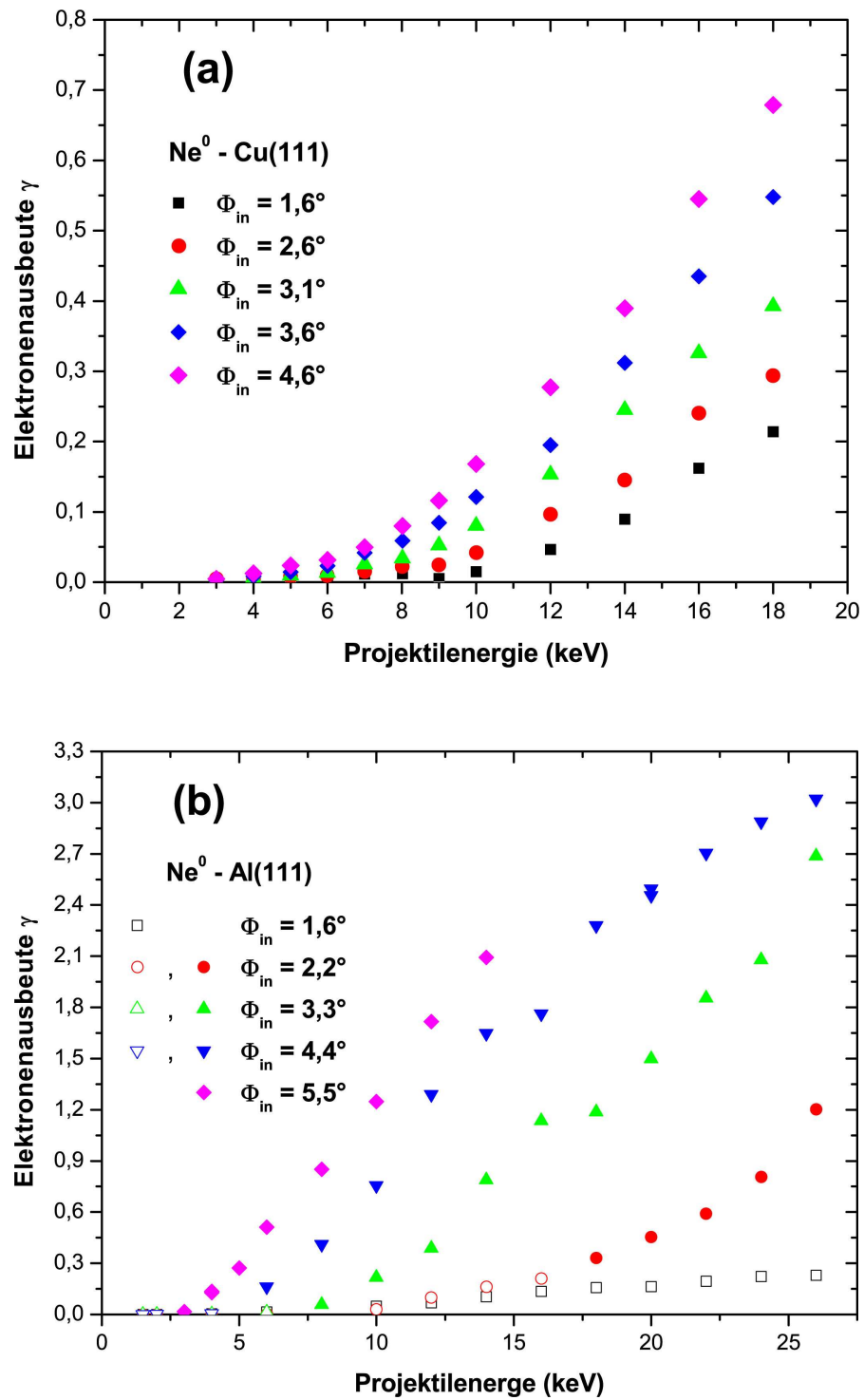


Abbildung 6.2: Elektronenausbeute als Funktion der Projektilenergie für verschiedene Einfallswinkel Φ_{in} bei der Streuung von Ne^0 an (a) Cu(111) und (b) Al(111)

in Koinzidenz mit einem emittierten Elektron und denen ohne Elektronenemission

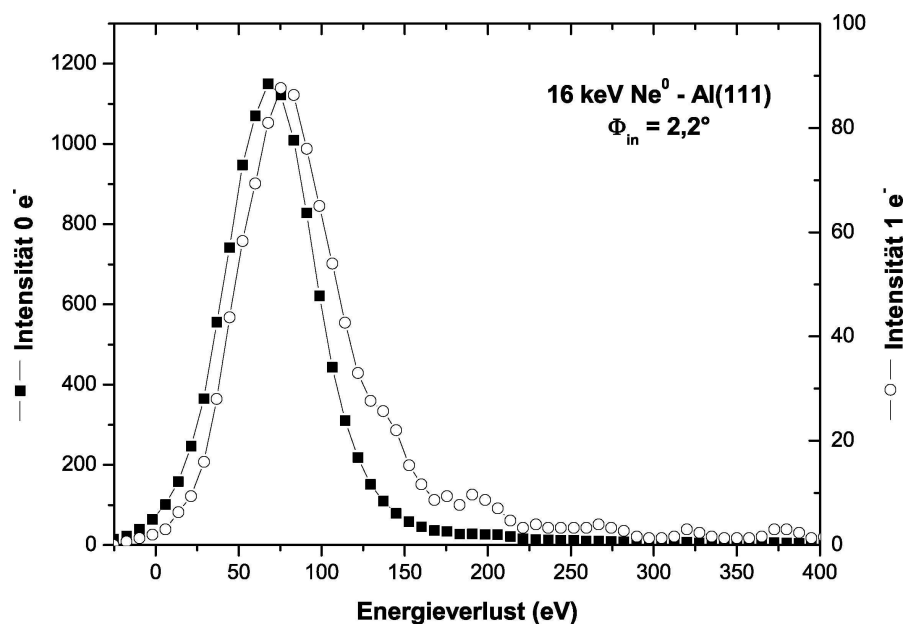


Abbildung 6.3: Energieverlustspektren, koinzident mit der Emission von keinem (Quadrate) und einem Elektron (offene Kreise), bei der Streuung von 16 keV Ne⁰ an Al(111) unter $\Phi_{in} = 2,2^\circ$

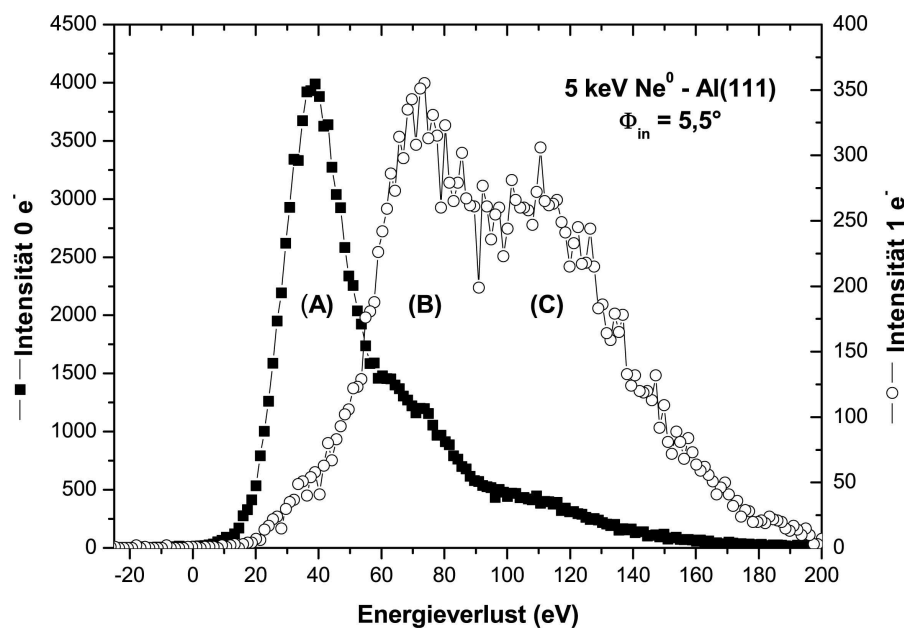


Abbildung 6.4: Energieverlustspektren, koinzident mit der Emission von keinem (Quadrate) und einem Elektron (offene Kreise), bei der Streuung von 5 keV Ne⁰ an Al(111) unter $\Phi_{in} = 5,5^\circ$

beträgt ca. 10 eV. Dieser Wert liegt im Bereich des maximalen Energieübertrags eines Neonatoms an ein Fermi-Elektron von Aluminium (Gleichung 5.8). Abbildung 6.4 zeigt eine äquivalente Darstellung für die Streuung von 5 keV Neon an

Al(111) unter einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 5,5^\circ$ ($E_{\perp} = 45,6$ eV). Im Gegensatz zu Abbildung 6.3 sind hier deutliche Strukturen zu erkennen. Für Peak (B) ergibt sich ein zusätzlicher Energieverlust im Bezug zum Signal ohne Elektronenemission (A) von $\Delta E = 33,7$ eV, für (C) $\Delta E = 75,7$ eV. Diese Verschiebungen lassen sich nicht durch binäre Stöße mit Valenzelektronen erklären. Nach Gleichung 5.8 beträgt der maximale Energieübertrag eines 5 keV Ne^0 -Atoms auf ein Fermi-Elektron von Aluminium 5,4 eV und liegt damit deutlich unter den beobachteten Werten.

Der hier dominierende Elektronenemissionsmechanismus läßt sich auf die Anregung des Neonatoms bei der Streuung an einzelnen Atomen der Oberfläche zurückführen [62, 72]. Xu et al. [72] fanden für diesen Prozess eine Schwellenenergie von 230 eV bei einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 20^\circ$. Die aus diesen Streubedingungen resultierende Senkrechterenergie entspricht dem in Abbildung 6.2 gezeigten Verhalten der Elektronenausbeute an Al(111). Durch die dichte Annäherung von Projektil und Oberflächenatom kommt es zur Ausbildung eines Quasimoleküls. Die Elektronenorbitale dieses Moleküls werden bei weiterer Annäherung entweder energetisch abgesenkt oder angehoben [73, 74, 75, 76]. Ist der Abstand klein genug, kann die Anhebung (Elektronenpromotion) der molekularen Orbitale (MO) so stark werden, dass die Niveaus über die Vakuumgrenze hinaus geschoben werden, was zur Ionisation eines Stoßpartners führen kann.

In Abbildung 6.5 ist das MO-Diagramm für die Wechselwirkung von Neon- und Aluminiumatomen in der Gasphase dargestellt [73]. Aus den von Sroubek et al. [73] durchgeführten Rechnungen folgt, dass das $\text{Ne}2p$ -Niveau bei Annäherung an Aluminium angehoben wird. In einem Abstand von unter 1,5 a.u. kreuzt es das $\text{Al}3s$ - und das $\text{Al}3p$ -Niveau und ab ca. 1,2 a.u. liegt es energetisch über der Vakuumgrenze.

Um den beobachteten Prozess der Elektronenanregung der Promotion zuweisen zu können, muß Übereinstimmung zwischen den Ionisationsenergien von Neon und den gemessenen Energieverlusten herrschen. Die Ionisationsenergie von Ne^0 beträgt 20,6 eV und ist damit 13,1 eV geringer als die gemessene Differenz des ersten Peaks im Ein-Elektronen-Signal zum elastischen Peak von Abbildung 6.4. Auf der Grundlage von Computersimulationen läßt sich dieser zusätzliche Energieverlust auf einen unterschiedlichen nuklearen Energietransfer auf die Aluminiumatome für Projektile mit Stoßparametern $b < 1,2$ a.u. bzw. $b > 1,2$ a.u. erklären.

In den Simulationen wurden die nuklearen Energieverluste anhand von klassischen

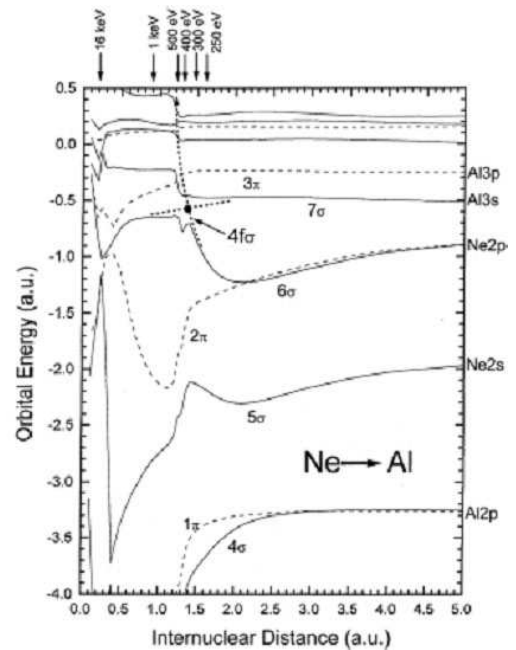


Abbildung 6.5: MO-Diagramm für das System Ne-Al [73]

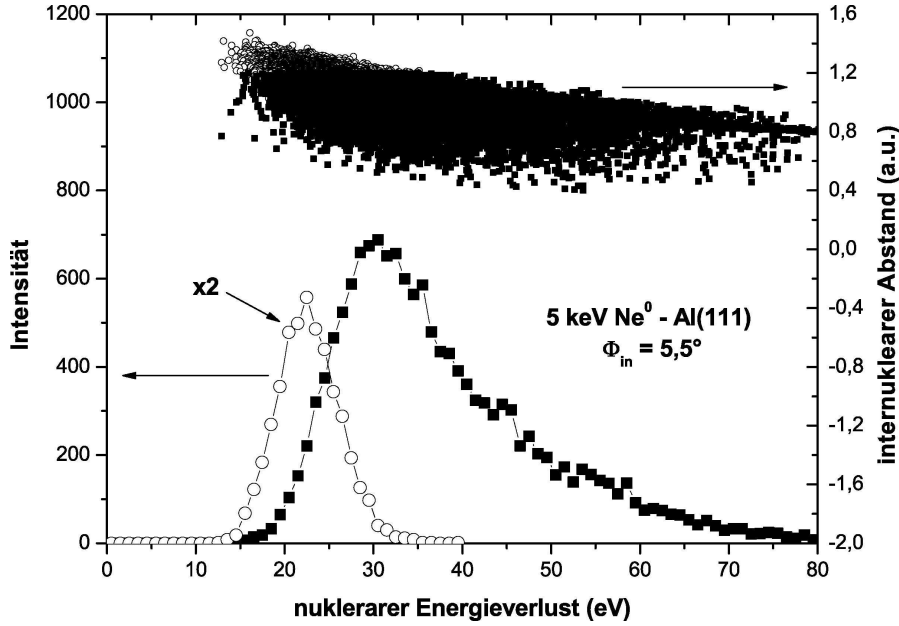


Abbildung 6.6: Simulierte internukleare Anstände und nukleare Energieverluste bei der Streuung von 5 keV Ne^0 an $\text{Al}(111)$ unter $\Phi_{in} = 5,5^\circ$; offene Symbole $b > 1,2$ a.u., volle Symbole $b \leq 1,2$ a.u.

Trajektorien berechnet. Als Wechselwirkungspotential diente dabei das angepasste Potential für das System $\text{Ne-Al}(111)$ aus Kapitel 2.3 mit den Parametern aus Tabelle 2.3. Die Integration der thermischen Schwingungen der Gitteratome erfolgte nach dem Debye-Modell [77] (Gleichung 6.1, mit T : Targettemperatur, M_T : Masse der Targetatome, k_B : Boltzmann-Konstante, Θ_D : Debye-Temperatur).

$$\langle u^2 \rangle = \frac{3\hbar^2 T}{M_T k_B \Theta_D^2} \quad (6.1)$$

Für eine Aluminiumoberfläche folgt damit $\langle u^2 \rangle \approx 0,2$ a.u. bei Raumtemperatur. Im Laborsystem resultiert die Energie des Projektils nach dem Stoß mit einem Targetatom aus Gleichung 6.2.

$$E' = E \left(\frac{M_P}{M_P + M_T} \right)^2 \left(\cos \Theta \pm \sqrt{\left(\frac{M_T}{M_P} \right)^2 - \sin^2 \Theta} \right)^2 \quad (6.2)$$

Dabei sind M_P und M_T die Massen von Projektil und Target und Θ der Streuwinkel. Da bei dieser Simulation die Wechselwirkungen mit den einzelnen Gitteratomen untersucht werden, kann keine Näherung aufgrund von Symmetrien stattfinden. Die Oberfläche wird durch einen Cluster aus $12 \times 12 \times 3$ Atomen repräsentiert. Die Simulation der Oberfläche erfolgt bei der Projektilbewegung dahingehend, dass der Cluster beim Verlassen einer Einheitszelle mitbewegt wird. Somit wird sichergestellt, dass sich das auf das Projektil wirkende Potential stets aus der gleichen Anzahl von Oberflächenatomen zusammensetzt. Damit die Computersimulation möglichst nahe am Experiment liegt, werden auf der auslaufenden

Trajektorie nur die Atome berücksichtigt, die im Öffnungswinkel des Channelplates das Target verlassen. Der Startpunkt der Projektile wird zufällig innerhalb der zentralen Einheitszelle und 15 a.u. oberhalb der Oberfläche gewählt. Für die Simulationsspektren wurden 100000 Trajektorien simuliert.

In Abbildung 6.6 sind die simulierten nuklearen Energieverlustspektren zusammen mit den dichtesten Annäherungen der Projektile an die Targetatome bei der Streuung von 5 keV Ne^0 an Al(111) unter einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 5,5^\circ$ dargestellt. Zur Separation der Projektile, die nicht dem Elektronenpromotionsprozess unterliegen, von denjenigen, die ihn durchlaufen, wurden die Spektren geteilt. Die offenen Symbole entsprechen Projektile mit Stoßparametern $b > 1,2$ a.u. (keine Promotion) und die ausgefüllten Symbole denjenigen mit $b \leq 1,2$ a.u. (Promotion).

Das entscheidende Resultat dieser Computersimulationen ist das Entstehen zweier Energieverlustverteilungen mit einer Verschiebung des mittleren Energieverlustes von über 10 eV. Bei der experimentellen Streuung von Ne^0 an Al(111) resultiert die Energiedifferenz der Peaks damit zum einen aus dem zusätzlichen nuklearen Energieverlust und zum Zweiten aus der Energie, die aufgebracht werden muß, um ein $2p^6$ -Elektron des Projektils über die Vakuumgrenze anzuheben. Als weiteres Ergebnis läßt sich festhalten, dass ein Großteil des Energieverlustes im elastisch gestreuten Peak (A) in Abbildung 6.4 durch Stöße des Projektils mit Atomen der Oberfläche begründet ist.

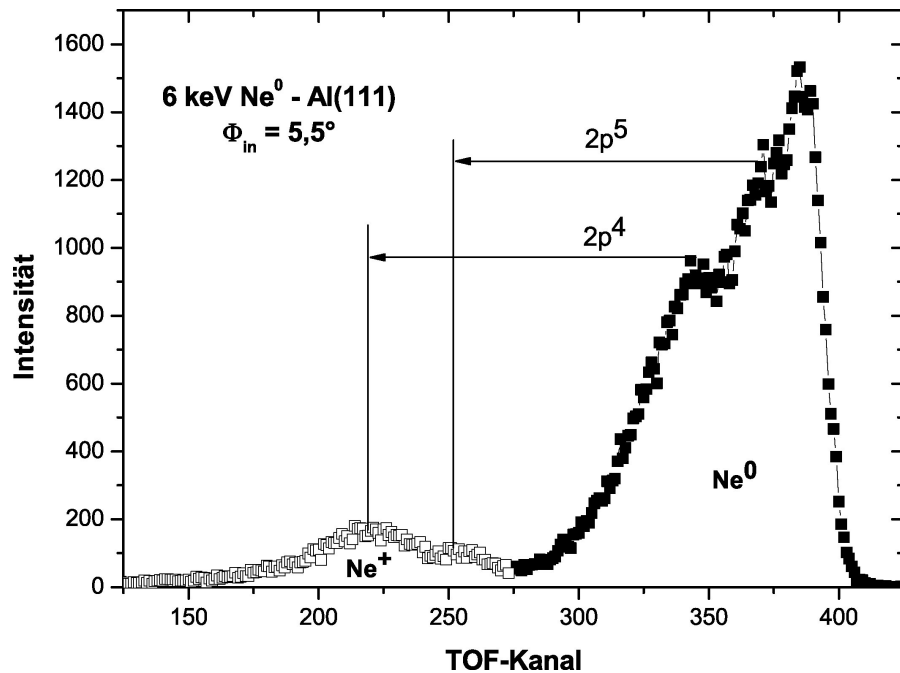


Abbildung 6.7: Ladungstrenntes TOF-Spektrum bei der Streuung von 6 keV Ne^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 5,5^\circ$; offene Symbole $\text{Ne}^0 \rightarrow \text{Ne}^+$, volle Symbole $\text{Ne}^0 \rightarrow \text{Ne}^0$

Der dritte Peak (C) in Abbildung 6.4 wird der doppelten Elektronenpromotion in $2p^4nl n'l' \text{Ne}^{**}$ -Zustände mit Anregungsenergien von ca. 45 eV [75, 78] und Dop-

pelionisation ($2p^4Ne^{++}$, Ionisationsenergie ca. 63 eV) zugeschrieben. Die doppelt angeregten Zustände zerfallen durch Autoionisation, was die Emission eines Elektrons zur Folge hat [79]. Die Doppelanregung bzw. -ionisation als Folge zweier separater Stöße kann aufgrund der Energieverluste sowie aus Messungen zur Ladungsverteilung im TOF-Spektrum ausgeschlossen werden. In Abbildung 6.7 ist ein solches ladungsgetrenntes TOF-Spektrum für die Streuung von 6 keV Ne^0 an Al(111) unter einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 5,5^\circ$ dargestellt. Die nach der Wechselwirkung mit der Oberfläche neutralen Projektile werden durch volle Quadrate repräsentiert, Ne^+ durch offene. Die elastisch gestreuten Projektile bilden bei der Streuung $Ne^0 \rightarrow Ne^0$ den dominanten Anteil, gefolgt von einfachen Promotionsanregungen ($2p^5Ne^+ + e^-$ oder $2p^5nlNe^*$). Wechselwirkungsmechanismen die Peak (C) in Abbildung 6.4 zugeschrieben werden, spielen die geringste Rolle. Ein anderes Bild ergibt sich bei der Betrachtung der Streuung $Ne^0 \rightarrow Ne^+$. Der dominante Wechselwirkungskanal wird von den doppelt angeregten Neonprojektilen ($2p^4nl n'l'Ne^{**}$) gebildet. Würde die Ursache für Peak (C) in Abbildung 6.4 in zwei aufeinanderfolgenden Anregungen in $2p^5$ -Niveaus liegen, dann müßte das Peakverhältnis für $Ne^0 \rightarrow Ne^+$ dem für $Ne^0 \rightarrow Ne^0$ entsprechen. Dieses Verhalten wird in Abbildung 6.7 nicht beobachtet.

Aufgrund der langen Lebensdauer des Ne^{**} von ca. $1,4 \times 10^{-14}$ s [80] und der kurzen Wechselwirkungszeit bei den aktuellen Projektilenergien erfolgt die Autoionisation relativ weit entfernt von der Oberfläche. Dadurch reduziert sich die Neutralisationswahrscheinlichkeit der entstandenen Ne^+ -Ionen und der Anteil der überlebenden Ionen wird, wie in Abbildung 6.7 beobachtet, erhöht.

In anderen Arbeiten wurde die Elektronenpromotion ausschließlich über die Energie und die Anzahl der emittierten Elektronen untersucht [75, 81, 82, 79]. Dies ermöglicht die genaue Zuordnung des nachgewiesenen Elektrons zu seinem Ausgangszustand und damit genaue Aussagen über die an der Promotion beteiligten Neonorbitale. In Tabelle 6.1 sind zur Veranschaulichung Anregungsenergien in verschiedene $2p^4$ - bzw. $2p^5$ -Konfigurationen bezüglich des $2p^6Ne$ -Grundzustandes zusammengefaßt [74].

Bedingt durch den in dieser Arbeit verwendeten Elektronendetektor geht diese Information verloren. So ermöglicht die koinzidente Erfassung der Energieverluste gestreuter Projektile zusammen mit der Anzahl der emittierten Elektronen zwar die Zuordnung zu Anregungen in $2p^5$ - bzw. $2p^4$ -Niveaus, die genaue Angabe der Niveaus ist aber nicht möglich. Trotz dieses Nachteils resultiert aus der Koinzidenz jedoch ein Vorteil. So können aus den Energieverlustspektren der einzelnen Elektronenzahlen Abschätzungen über die Anteile der emittierten Elektronen zu den nicht emittierten angegeben werden. Diese Information ist den herkömmlichen Methoden nicht zugänglich, da nur die Elektronen betrachtet werden.

In Abbildung 6.8 sind noch einmal die Energieverlustspektren koinzident mit der Emission von keinem (volle Quadrate), einem (offene Kreise) und zwei (offene Dreiecke) Elektronen bei der Streuung von 5 keV Ne^0 an Al(111) unter einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 5,5^\circ$ dargestellt. Zusätzlich wurden die theoretischen Anregungsenergien nach [74] unter Berücksichtigung des simulierten nuklearen

Endzustand	Energie (eV)
$Ne^*(2p^5 3s)$	16,67
$Ne^*(2p^5 3p)$	18,67
$Ne^+(2p^5 + e^-)$	21,56
$Ne^{**}(2p^4 3s^2)$	45,15
$Ne^{**}(2p^4 3s 3p)$	48,9
$Ne^{**}(2p^4 3s 3d)$	50,05
$Ne^{+*}(2p^4 3s + e^-)$	52,11
$Ne^{**}(2p^4 3p^2)$	52,35
$Ne^{+*}(2p^4 3p + e^-)$	55,76
$Ne^{++}(2p^4 + 2e^-)$	62,35

Tabelle 6.1: Anregungsenergien des $2p^6 Ne$ -Grundzustandes nach [74]

Energieverlustes bezogen auf den elastisch gestreuten Peak als vertikale Linien eingezeichnet. Dabei zeigt sich eine gute Übereinstimmung zu den experimentell bestimmten Daten. Die gesamte Elektronenausbeute beträgt $\gamma = 0,16$. An Promotionsmechanismen beteiligt sind ca. 50 % aller gestreuten Projektile, 20 % der Anregungen in $2p^5$ - und 45 % der in $2p^4$ -Konfigurationen resultieren in der Emission eines Elektrons. Die direkte Doppelionisation ($2p^4 Ne^{++}$) bildet mit 8 % den

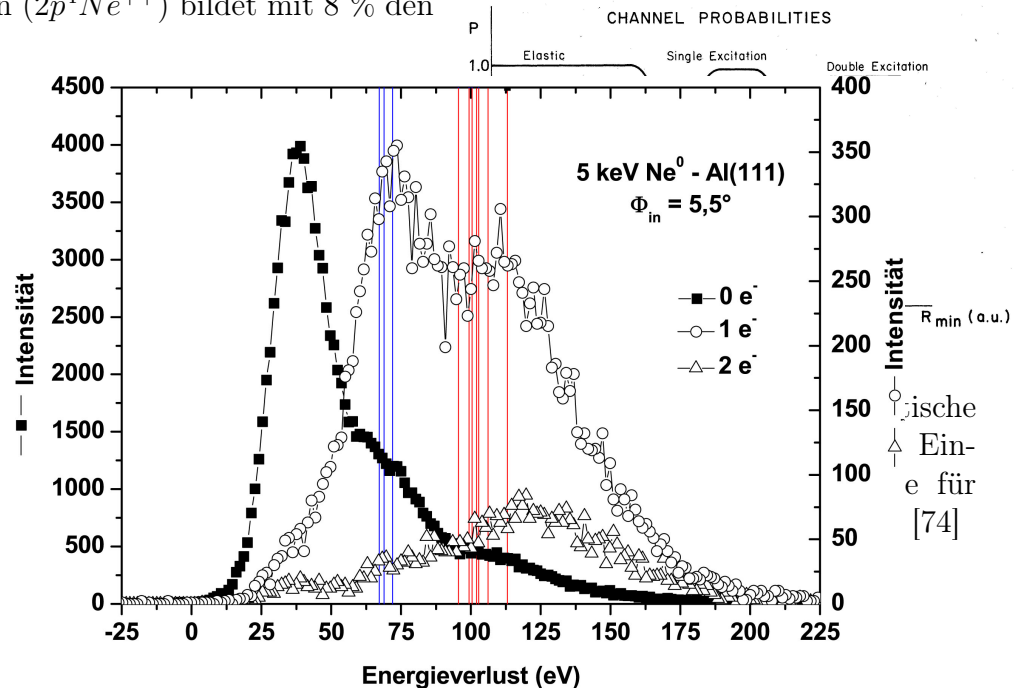


Abbildung 6.8: Energieverlustspektren für die Emission von keinem (volle Quadrate), einem (offene Kreise) und zwei (offene Dreiecke) Elektronen bei der Streuung von 5 keV Ne⁰ an Al(111) unter $\Phi_{in} = 5,5^\circ$; blaue Linien: theoretische Lage der $2p^5$ -Niveaus, rote Linien: theoretische Lage der Niveaus für $2p^4$ -Konfigurationen

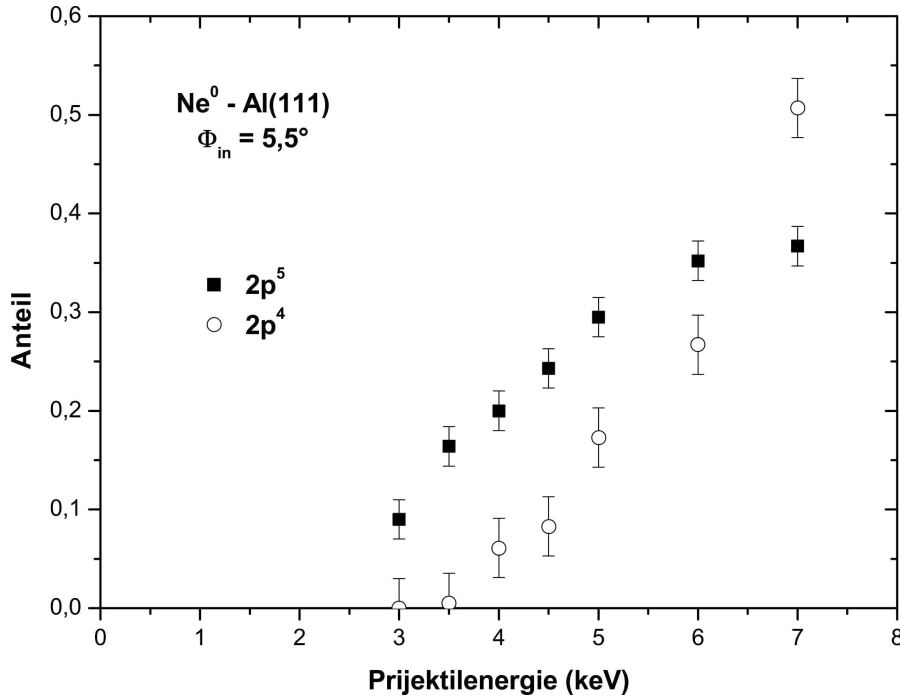


Abbildung 6.9: Anteile der $2p^4$ - und $2p^5$ -Anregungen als Funktion der Projektilenergie bei der Streuung von Ne^0 an $\text{Al}(111)$ unter $\Phi_{in} = 5,5^\circ$

geringsten Anteil. Unter Verwendung derartiger Informationen sind in Abbildung 6.9 die Anteile von Anregungen in $2p^4$ - und $2p^5$ -Konfigurationen als Funktion der Projektilenergie unter einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 5,5^\circ$ dargestellt. Bei geringen Energien dominiert die Einfachpromotion, welche ab ca. 6 keV sättigt. Die Doppelanregungen setzten erwartungsgemäß bei höheren Energien ein, da für diese Art der Wechselwirkung geringere Abstände zwischen den Stoßpartnern notwendig sind. Für $E_0 > 6$ keV überwiegen schließlich die Zwei-Elektronen-Prozesse. Eine Auswertung bei höheren Projektilenergien ist aufgrund der Verbreiterung der Energieverlustspektren, bedingt durch die steigende Primärenergie, nicht möglich. Theoretische Arbeiten von Olsen et al. [74] zur Wechselwirkung von Ne mit Na in der Gasphase zeigen ebenfalls die starke Abhängigkeit der Wahrscheinlichkeiten der Wechselwirkungskanäle vom Abstand der Stoßpartner. In Abbildung 6.10 ist die von Olsen et al. berechnete Wahrscheinlichkeit für elastische Streuung sowie für Ein- und Zwei-Elektronen-Prozesse als Funktion des

Abstandes dargestellt. Obwohl die Abstände aus Abbildung 6.10 aufgrund des anderen Stoßpartners nicht auf die Streuung an der Al(111)-Oberfläche übertragbar sind, sind die generellen Trends zu erkennen.

In Abbildung 6.11 (a) sind die relativen Anteile aus Abbildung 6.9 als Funktion des minimalen Abstandes aufgetragen. Wie in den Betrachtungen von Olsen et al. beginnen bei großen Abständen die Ein-Elektronen-Prozesse. Verringert sich dann die räumliche Separation der Wechselwirkungspartner starten die Zwei-Elektronen-Prozesse, um bei noch kleineren Distanzen dominant zu werden. Anders als in der Gasphase läßt sich im untersuchten Abstandsbereich jedoch nicht der Anstieg auf Eins für einen der beiden Wechselwirkungskanäle beobachten. Dies kann als Folge der streifenden Streuung interpretiert werden. Für jede Wechselwirkung zwischen dem gestreuten Neonatom und einem Targetatom muß für die Promotion von einem oder zwei Elektronen ein Übergang zwischen den beteiligten adiabatischen Potentialkurven (siehe Abb. 6.5) stattfinden. Derartige Übergänge können über eine Theorie von Landau und Zener beschrieben werden [83]. Die Übergangswahrscheinlichkeit P_{LZ} zwischen den Potentialkurven V_a und V_b kann für kleine Geschwindigkeiten durch Gleichung 6.3 beschrieben werden.

$$P_{LZ} = 1 - \exp \left[-\frac{\tau_x}{\tau_{ab}} \right] \quad (6.3)$$

Die Durchlaufzeit τ_x durch den Schnittpunkt der Potentialkurven ist über die Wechselwirkungslänge

$$\delta R_x = \left| 2 \frac{V_{ab}}{\frac{d}{dR}(V_a - V_b)} \right|_{R_x} \quad (6.4)$$

und die Geschwindigkeit $v = dR/dt$ definiert.

$$\tau_x = \frac{\delta R_x}{|dR/dt|_{R_x}} \quad (6.5)$$

Aus der Unschärferelation folgt die Zerfallszeit der Wechselwirkung.

$$\tau_{ab} = \frac{1}{\pi |V_{ab}|_{R_x}} \quad (6.6)$$

Für den Fall kleiner Energiedefekte ΔE zwischen den Orbitalen, läßt sich das Übergangsmatrixelement V_{ab} durch $\frac{1}{2}|\Delta E|$ annähern [83]. Die Übergangswahrscheinlichkeit hängt damit maßgeblich von der Projektilgeschwindigkeit sowie dem Energiedefekt und damit vom minimalen Abstand der Stoßpartner ab. Durch die thermischen Auslenkungen der Targetatome existiert im Experiment eine Verteilung von Stoßparametern. Dadurch ist die Übergangswahrscheinlichkeit für die einzelnen Wechselwirkungen entlang der Trajektorie verschieden. Diese Wahrscheinlichkeiten sind auch der Grund dafür, warum die Simulation in Abbildung 6.6 den Promotionsanteil im Vergleich zum Experiment stark überschätzt, da dort jedes Projektil mit einem Stoßparameter $b \leq 1,2$ a.u. der Promotion zugeschrieben wurde.

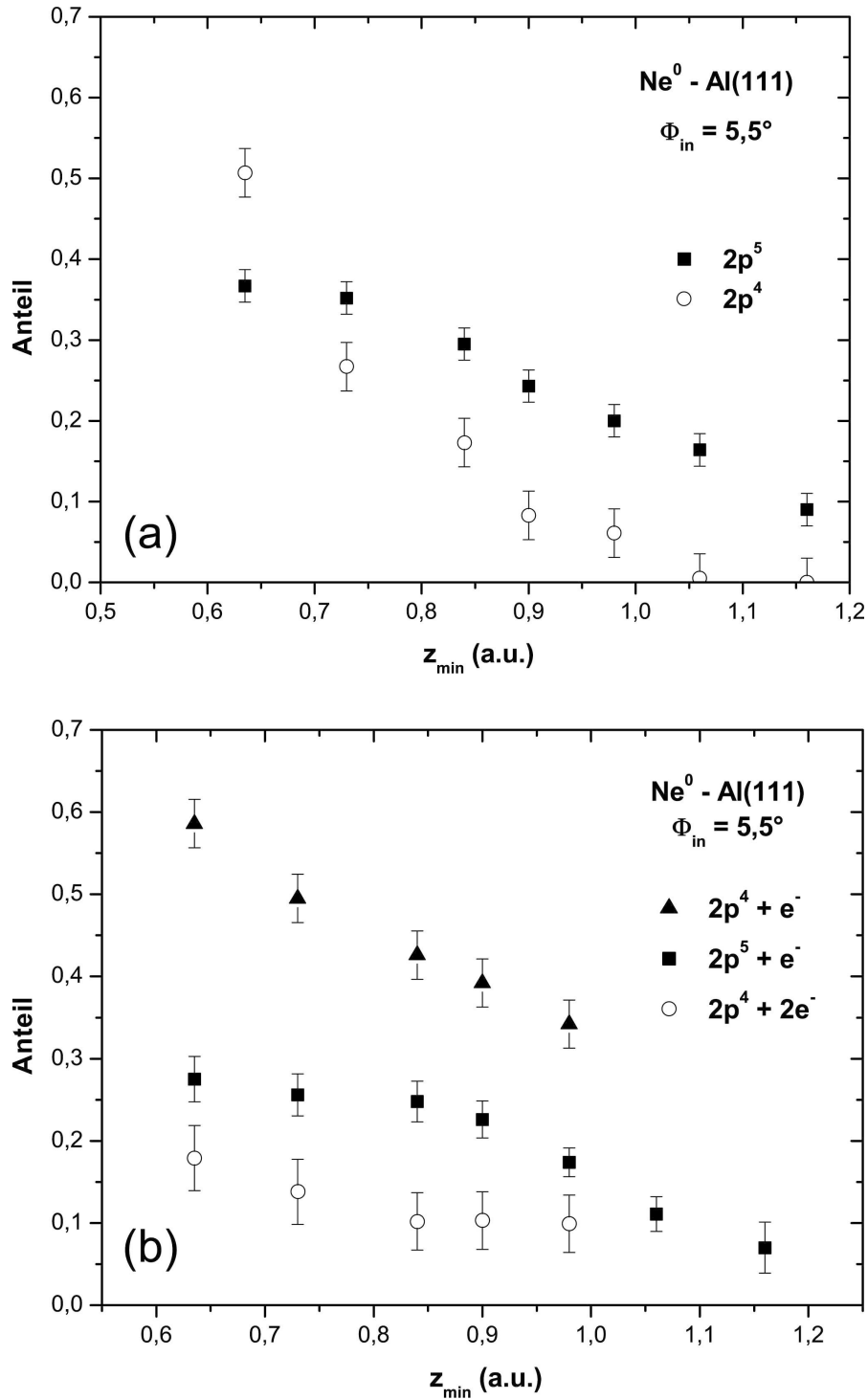


Abbildung 6.11: (a) relative Anteile der Anregungen in $2p^4$ - (offene Kreise) und $2p^5$ -Konfigurationen (volle Quadrate) als Funktion von z_{\min} ; (b) relative Anteile der Anregungen die zu Elektronenemission führen: $2p^5 + e^-$ (volle Quadrate), $2p^4 + 2e^-$ (offene Kreise), $2p^4 + e^-$ (volle Dreiecke) als Funktion von z_{\min}

In Abbildung 6.11 (b) sind die relativen Anteile an den Promotionskonfigurationen, die zur Emission von Elektronen beitragen, als Funktion des Abstandes zur Oberfläche dargestellt. Wie schon bei der Betrachtung der Promotion eines Elektrons läßt sich für die Beiträge, die schließlich ein Elektron emittieren (volle Quadrate in der Abbildung) eine Sättigung bei ca. 30 % beobachten. Sind zwei Elektronen an der Promotion beteiligt, steigt die Zahl der zur Elektronenemission führenden Prozesse kontinuierlich mit geringer werdendem Abstand an. Dabei ist im auswertbaren Energie- und Abstandsbereich die Wahrscheinlichkeit, dass eines der beiden Elektronen das Quasimolekül ins Vakuum verläßt, immer höher als die für die Emission beider.

6.2 Compton-Profil und „heiße“ Elektronen

In Kapitel 5.3.2 wurde für die Streuung von Heliumatomen im Grundzustand die kinetische Elektronenemission an der Schwelle über ein klassisches Stoßmodell zwischen Projektil und Valenzelektronen beschrieben. Aufbauend auf diesen Untersuchungen wurden Experimente für die Streuung von Argonatomen durchgeführt. Dabei zeigt sich, dass die Elektronenemission oberhalb der Schwellengeschwindigkeit dem Modell aus Kapitel 5.3.1 folgt, jedoch unterhalb von v_{th} kleine aber definierte Elektronenausbeuten nachgewiesen werden. In diesem Abschnitt wird gezeigt, dass das Auftreten kinetischer Elektronenemission unterhalb der klassischen Schwelle Informationen über das Elektronenimpulsspektrum („electron momentum spectrum“, EMS) der lokalen Oberflächenzustandsdichte bietet. EMS-Spektroskopie und Messungen der eindimensionalen Impulsdichte (Compton-Profil) sind etablierte Methoden zur Bestimmung der elektronischen Struktur im Volumen von Festkörpern. Durchgeführt werden derartige Untersuchungen mittels Photon-Elektron-Streuung ($\gamma, \gamma e$) [84], Streuung hochenergetischer Elektronen ($e, 2e$) [85] und Streuung hochenergetischer Ionen [86]. Bei all diesen Methoden werden hohe Energien benötigt, um sicherzustellen, dass der Impulsübertrag Δk groß gegenüber der Breite der Impulsverteilung ist. Durch die bei hohen Energien bedingten großen Eindringtiefen sind diese Methoden nicht sensitiv auf die Oberfläche. Durch die Verwendung der streifenden Streuung atomarer Projektile ist Sensitivität bezüglich der Oberfläche gegeben.

In Abbildung 6.12 ist der Energieverlust bei der Streuung von He^0 (volle Dreiecke), Ne^0 (offene Kreise) und Ar^0 (volle Quadrate) an Al(111) im Bereich der Schwelle der kinetischen Elektronenemission als Funktion der Projektilgeschwindigkeit für einen Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 2,2^\circ$ dargestellt. Für eine vergleichende Darstellung der Streuung dieser drei Edelgase, bei der die Wechselwirkung mit Valenzelektronen betrachtet werden soll, ist aufgrund der in Kapitel 6.1 beschriebenen Elektronenpromotion bei der Streuung von Neon ein größerer Einfallswinkel zu vermeiden. Auffälligstes Ergebnis in Abbildung 6.12 sind die um ca. einen Faktor 4 höheren Energieverluste bei der Streuung von Argon im Vergleich zu He^0 und Ne^0 . Unter den experimentellen Bedingungen der Abbildung weisen Helium

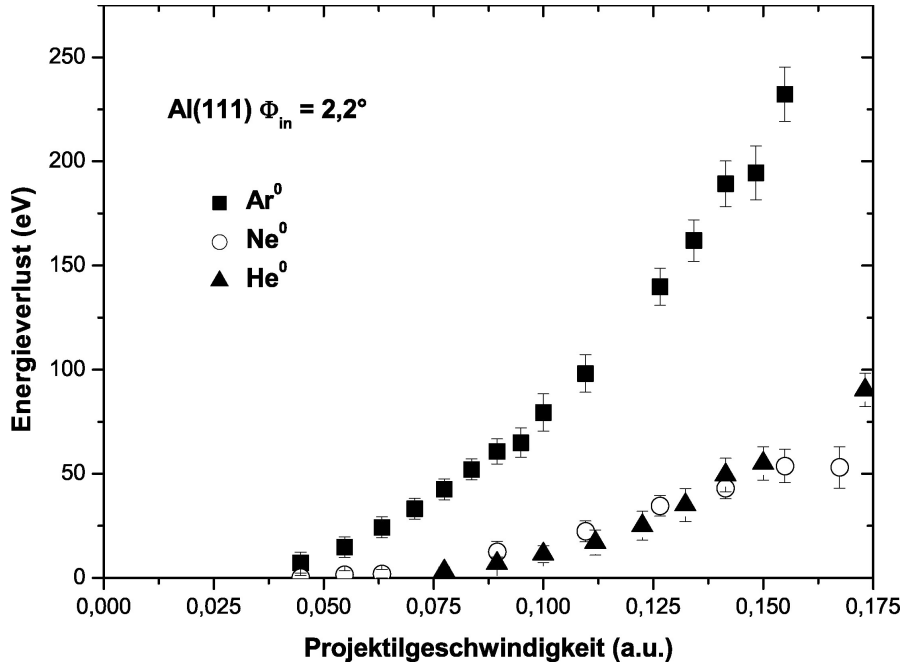


Abbildung 6.12: Energieverlust als Funktion der Projektilgeschwindigkeit bei der Streuung von He^0 (volle Dreiecke), Ne^0 (offene Kreise) und Ar^0 (volle Quadrate) an $\text{Al}(111)$ unter $\Phi_{in} = 2,2^\circ$

und Neon im Rahmen der Fehler vergleichbare Energieverluste auf.

In Abbildung 6.13 sind die Quadratwurzeln der Elektronenausbeuten für die Streuung der drei Edelgase (He^0 Dreiecke, Ne^0 Kreise und Ar^0 Quadrate) unter den Bedingungen von Abbildung 6.12 dargestellt. Auch hier liegen die Werte für die Streuung von Argon um ca. einen Faktor 2 und damit einen Faktor 4 in den Ausbeuten über denen der Streuung von Neon. Im Gegensatz zum Energieverlust emittieren die Heliumprojekte allerdings weniger Elektronen als die Neonatome. Das entscheidende Resultat von Abbildung 6.13 ist das Auftreten kinetischer Elektronenemission für Argon und Neon unterhalb der klassischen Schwelle für den Festkörper (vertikale Linie).

Diese Ausbeuten lassen sich nicht durch Stöße mit Valenzelektronen erklären, die der quadratischen Dispersion $E(k) = k^2/2$ gehorchen.

Kinetische Elektronenemission unterhalb der klassischen Schwelle (Gl. 5.10) wurde erstmals von Eder et al. [87] für senkrechten Einfall schwerer Ionen auf polykristallinem Gold beobachtet und von Lörincik et al. [61] theoretisch beschrieben. Das Auftreten dieser „subthreshold“ Emission kann mehrere Gründe haben, die im Folgenden diskutiert werden sollen.

1. Elektronenemission aufgrund der im Projektil gespeicherten potentiellen Energie (Potentialemission): Dieser Prozess kann durch den geringen Anteil von an der Streuung beteiligten Ionen von weniger als 10^{-5} ausgeschlossen werden.

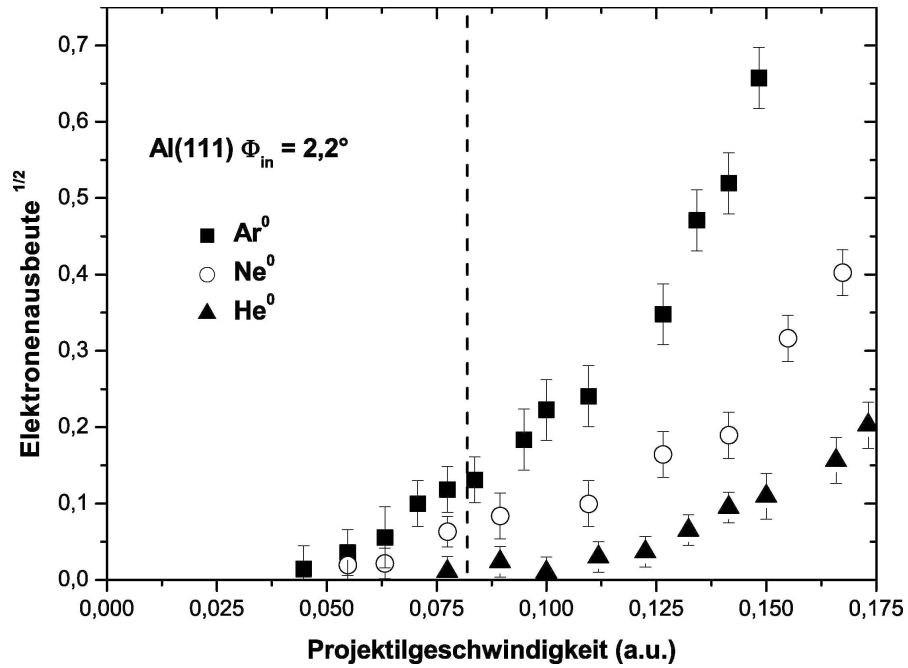


Abbildung 6.13: Quadratwurzeln der Elektronenausbeuten als Funktion der Projektilgeschwindigkeit bei der Streuung von He^0 (volle Dreiecke), Ne^0 (offene Kreise) und Ar^0 (volle Quadrate) an Al(111) unter $\Phi_{in} = 2,2^\circ$

2. Elektronenemission aufgrund der Abregung metastabiler Projektile im direkten Strahl: Sollten während der Neutralisation der beschleunigten Ionen metastabile Zustände besetzt werden, dann wären diese im Flugzeitspektrum des direkten Strahles, anhand von Asymmetrien oder zusätzlichen Peaks, erkennbar. Durch translationsenergetische Untersuchungen am einfallenden Atomstrahl konnte dieser Effekt ausgeschlossen werden. In Abbildung 6.14 ist repräsentativ das auf die Energieverlustskala umgerechnete Flugzeitspektrum des direkten Strahls für 6 keV Ar^0 dargestellt. Es weist weder Asymmetrien noch zusätzliche Peaks auf, sodass metastabile Anteile auszuschließen sind.
3. Die Bildung negativer Ionen während der Streuung und der nachfolgende Zerfall unter der Emission eines Elektrons: Diese kinetische Elektronenemission konnte bei der Streuung von Atomen an ionischen Isolatoren nachgewiesen werden [22, 23]. Dieser Effekt sollte bei der Streuung von Wasserstoff dominant sein, wo Anteile negativer Ionen von bis zu 10^{-3} nach der Streuung bei höheren Energien an Al(111) gefunden wurden [88]. Bei Untersuchungen zum Schwellenverhalten der kinetischen Elektronenemission für die Streuung von H^0 konnten allerdings keine Elektronenausbeuten unterhalb der klassischen Schwelle nachgewiesen werden [53] und für die Streuung von Ar^0 werden keine negativen Anteile erwartet.
4. Elektronenemission auf der Grundlage von Elektronenpromotion molekularer Orbitale in harten Stößen zwischen dem Projektil und einem Atom der

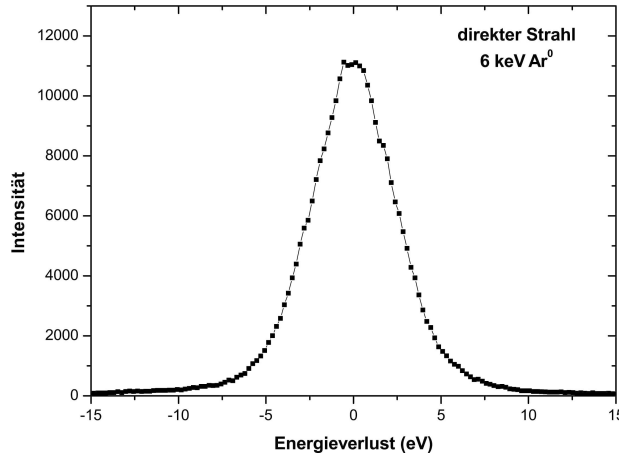


Abbildung 6.14: Energiespektrum des direkten Strahls für 6 keV Ar^0

Oberfläche: Dieser Prozess wurde für die Streuung von Ne^0 an $\text{Al}(111)$ bei Senkrechtenergien ≥ 25 eV beobachtet und ist anhand der Energieverlustspektren eindeutig identifizierbar (siehe Kapitel 6.1). In Abbildung 6.15 sind die koinzidenten Energieverlustspektren für die Emission von keinem und einem Elektron bei der Streuung von 3 keV Ne^0 (a) und 5 keV Ar^0 (b) an $\text{Al}(111)$ unter einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 2,2^\circ$ dargestellt. Weder bei der Streuung von Neon noch bei der von Argon sind Anzeichen für Elektronenpromotion zu beobachten. Im Fall der Streuung von Ne^0 müßte die Verschiebung des Ein-Elektronen-Signals bezüglich des Peaks für die Emission von keinem Elektron 20,6 eV betragen und für die Streuung von Ar^0 15,8 eV. Beides ist den Spektren nicht zu entnehmen. Vielmehr beträgt die Verschiebung ≤ 5 eV.

5. Die Streuung unter kleinen Stoßparametern bedingt durch Störungen der Oberfläche: Der zu diskutierende Geschwindigkeitsbereich für die „subthreshold“ Elektronenemission liegt unterhalb der Schwellengeschwindigkeit für den Festkörper, sodass selbst an Stufenkanten und dadurch bedingt höheren Elektronendichten die Energie der beteiligten Elektronen nicht über dem Wert für das Volumen liegen kann.
6. Elektronenemission bedingt durch eine Thermalisierung des Elektronengases: Sroubek [89] begründete das mögliche Auftreten von Elektronenemission unterhalb von v_{th} mit einer Thermalisierung des Elektronengases durch das Projektil. Durch die damit verbundene Verbreiterung der Fermi-Verteilung der Valenzelektronen sind vor der Oberfläche höhere Elektronenenergien möglich. Für die Streuung unter großem Einfallswinkel kann dieser Effekt nicht ausgeschlossen werden. In den Untersuchungen dieser Arbeit waren die Einfallswinkel jedoch klein, was eine große Wechselwirkungslänge der Projektile zur Folge hat. Eine Thermalisierung des Elektronengases bedingt die Anregung vieler benachbarter Elektronen. Bei der streifenden Streuung mit Wechselwirkungslängen von typischerweise > 100 a.u. betragen die Wech-

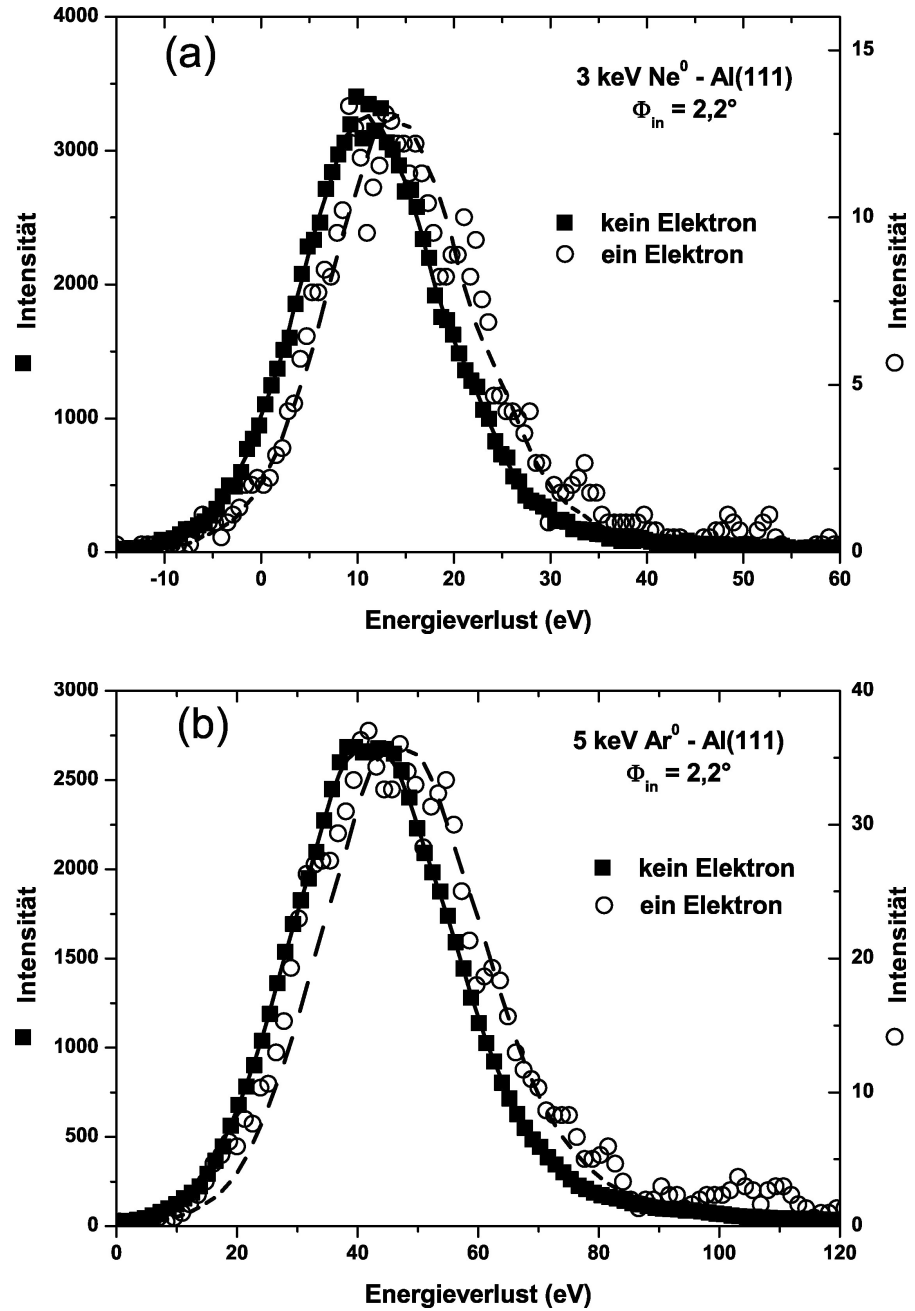


Abbildung 6.15: Energieverlustspektren für die Emission von keinem und einem Elektron bei der Streuung von (a) 3 keV Ne^0 und (b) 5 keV Ar^0 an Al(111) unter $\Phi_{\text{in}} = 2,2^\circ$

selbwirkungszeiten ≥ 10 fs. Diese Zeiten sind größer als die Lebensdauern angeregter Elektron-Loch-Paare [90, 91], wodurch in den vorliegenden Experimenten nur eine sehr geringe Anzahl benachbarter Elektronen zur gleichen Zeit in einem angeregten Zustand sind und die Thermalisierung dadurch stark reduziert wird.

Die bisherigen Erklärungen für das Auftreten von Elektronenemission unterhalb der klassischen Schwelle finden nach diesen Diskussionen keine Anwendung auf die experimentellen Befunde dieser Arbeit.

Bei der bisherigen Beschreibung des Schwellenverhaltens der kinetischen Elektronenemission über einen zentralen Stoß zwischen Projektil und Valenzelektron wurde von einer scharfen Impulsverteilung der Elektronen vor der Oberfläche und der quadratischen Dispersion $E(k) = k^2/2$ ausgegangen. Bei der realen Beschreibung der Impulsverteilung (Compton-Profil) der Oberflächenzustandsdichte an der Fermikante $\rho_s(\bar{k}, z, E_F)$ treten jedoch Impulse mit $k > k_F$ auf. Die Ursachen dafür liegen in der Potentialstufe nahe der Oberfläche, der Korrugation der Elektronendichte und der Korrelation der Elektronen [92, 93, 94]. In Abbildung 6.16 ist der

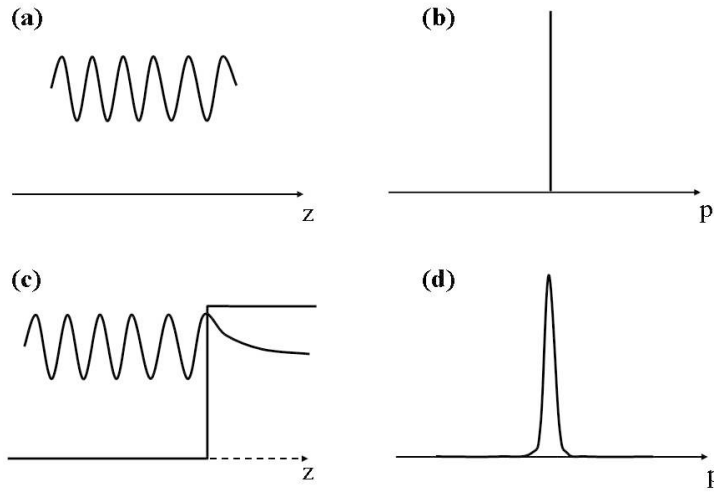


Abbildung 6.16: (a) ebene Welle und dazugehörige Impulsverteilung (b); Durch den Einfluß einer Potentialstufe geht (a) in (c) und (b) in (d) über.

Einfluß der Oberflächen-Barriere auf die Komponenten der Wellenfunktion und der dazugehörigen Impulsverteilung senkrecht zur Oberfläche skizziert. Für eine freie ebene Welle (a) resultiert eine Deltafunktion in der Impulsverteilung (b). Durch die Oberflächen-Barriere, in der Abbildung durch eine Potentialstufe vereinfacht, klingt die ebene Welle exponentiell ab (c), wodurch die Impulsverteilung verbreitert wird (d). Die höheren Impulskomponenten senkrecht zur Oberfläche haben auf die Elektronenemission bei streifender Streuung keinen Einfluß, da der Impuls- und Energieübertrag vom Projektil auf das Elektron parallel zur Oberfläche erfolgt. Entscheidend für Elektronenemission unterhalb der klassischen Schwelle sind die, durch die Korrugation der Elektronendichte vor der Oberfläche und die Korrelation der Elektronen [95] bedingten, höheren Impulskomponenten parallel zur Einfallsrichtung des Projektils. Experimentell sollten diese „off-(the energy-) shell“-Impulskomponenten mit $k \neq \sqrt{2E}$ gerade im Bereich unterhalb der klassischen Schwelle sichtbar werden, da dort die „on-(the energy-) shell“-Beiträge mit $k = \sqrt{2E}$, aufgrund des zu geringen Impulsübertrages, nicht zu Elektronenemission führen können.

Der Einfluß der „off-shell“-Impulskomponenten auf die Elektronenemission wurde durch Simulationen von Ch. Lemell¹ untersucht. Der theoretische Ansatz für diese Rechnungen basiert auf der Anwendung der „on-shell“-Näherung auf die Impulsnäherung („impulsive approximation“ (IA)) [92, 94] (Gleichung 6.7). Die „on-shell“-Näherung beschreibt ein Modell, in dem die Wellenfunktion des Elektrons in Impulsdarstellung als eine Wahrscheinlichkeitsverteilung der Impulse eines Ensembles von Elektronen interpretiert wird. Für die Elektronen des Ensembles gilt dann wieder $E = k^2/2$ [92].

$$\frac{d^2\sigma}{dE d\Omega} = \frac{k'}{v_p} \int_{k_{min}}^{k_{max}} k dk \int_0^{2\pi} d\phi \sigma_{el} \left(\frac{q'^2}{2}, \cos \Theta_e \right) \rho_s \left(\bar{k}, z_{min}, E_F \right) \quad (6.7)$$

In Gleichung 6.7 beschreibt Θ_e den polaren Winkel der Elektronenstreuung relativ zur Richtung des ankommenden Elektrons im Bezugssystem des Projektils, $\bar{q} = \bar{k} - \bar{v}_p$. Der Endimpuls des Elektrons im Bezugssystem des Projektils ist \bar{q}' mit $\bar{q}'^2/2 = \bar{q}^2/2$, wohingegen für das Laborsystem \bar{k}' gilt. Die Integrationsgrenzen k_{min} und k_{max} beschreiben das Intervall, in dem Beiträge von \bar{k} und Streuwinkel existieren, die zur Endzustandsenergie $E' = k'^2/2$ im Laborsystem führen. Die genäherte Impulsverteilung $\rho_s(\bar{k}, z_{min}, E_F)$ für die Al(111)-Oberfläche im Abstand z_{min} und nahe der Fermienergie E_F wurde dabei von Canney et al. [93] übernommen.

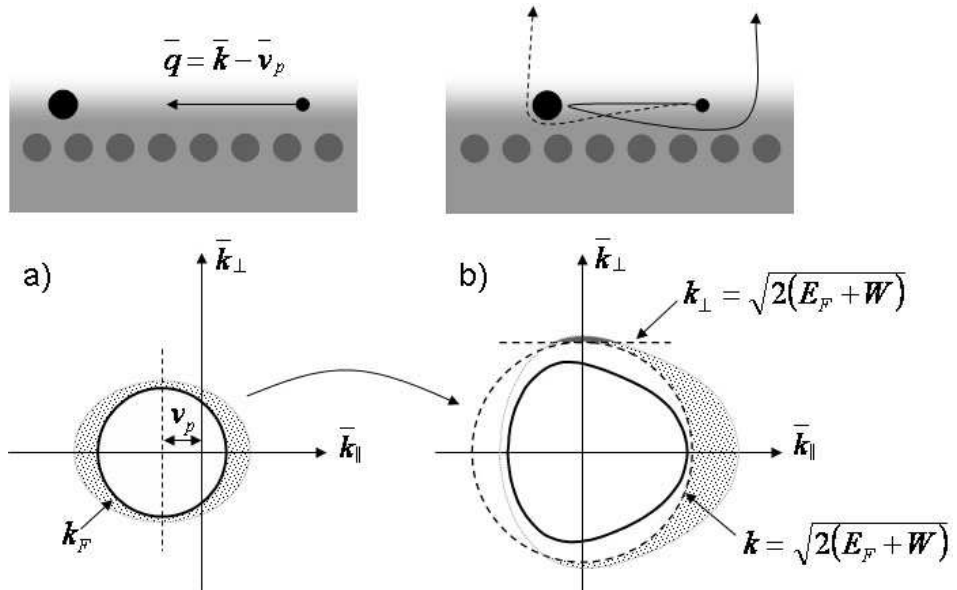


Abbildung 6.17: Schema von Impulsverteilung und Rückstreuung: (a) Ausgangsimpulsverteilung und Streugeometrie im Ruhesystem des Projektils; (b) finale Impulsverteilung im Laborsystem

In Abbildung 6.17 ist der Vorgang der Elektronenemission in der Rückstreuengeometrie durch hohe Impulskomponenten skizziert. Im Ruhesystem des Projektils wird

¹Institut für Theoretische Physik der Technischen Universität Wien

die Impulsverteilung um $-\bar{v}_p$ verschoben. Die klassische Fermi-Kugel mit maximalem Impuls k_F wird durch die durchgezogene Linie repräsentiert. Elektronenimpulse größer k_F treten in den schattierten Bereichen auf. Nach der Rückstreuung und Transformation ins Laborsystem existieren Elektronen mit Impulsen $k' >$

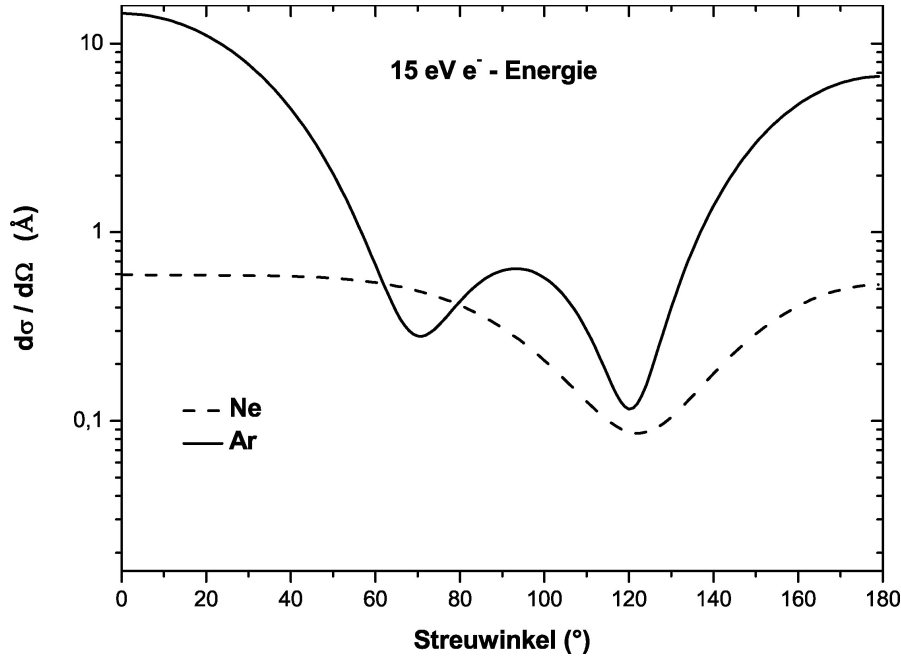


Abbildung 6.18: Differentielle Streuquerschnitte für die Streuung von Elektronen mit $E = 15$ eV an Argon und Neon als Funktion des Streuwinkels (Streuphasen aus [58] und [96])

$k'_{min} = \sqrt{2(E_F + W)}$, deren Energie ausreicht, um ins Vakuum zu gelangen. Für direkte Emission in Winkel nahe $\pi/2$ ($|k_{\perp}| > \sqrt{2(E_F + W)}$) existiert jedoch nur ein sehr kleines Phasenraumvolumen. Dazu kommt, dass die differentiellen Streuquerschnitte in diesem Winkelbereich sehr klein sind. Dies wird in Abbildung 6.18 sowohl für Argon als auch für Neon, wo die differentiellen Streuquerschnitte $d\sigma/d\Omega$ für die Streuung von 15 eV Elektronen als Funktion des Streuwinkels dargestellt sind (Streuphasen aus [58] und [96]), deutlich. Durch diese beiden Gegebenheiten kann die direkte Emission nahezu ausgeschlossen werden. Für Elektronenemission unterhalb der klassischen Schwelle sind die Bereiche mit Streuwinkeln nahe $\leq \pi$ dominant. In diesem Bereich existieren ein merkliches Phasenraumvolumen mit $k > \sqrt{2(E_F + W)}$ (schattierter Bereich in Abb. 6.17 (b)) und hohe Beiträge im differentiellen Streuquerschnitt. Durch weitere elastische Streuungen werden diese Elektronen emittiert. Aufgrund der großen freien Weglänge für Elektronen mit $E < 20$ eV in Metallen kann eine isotrope Emissionswahrscheinlichkeit der Elektronen angenommen werden. Damit wird die Elektronenausbeute proportional zum Phasenraumvolumen der angeregten Elektronen.

In Abbildung 6.19 sind nochmals die Quadratwurzeln der experimentellen Elektronenausbeuten bei der Streuung von Ar^0 und Ne^0 an $\text{Al}(111)$ unter einem Ein-

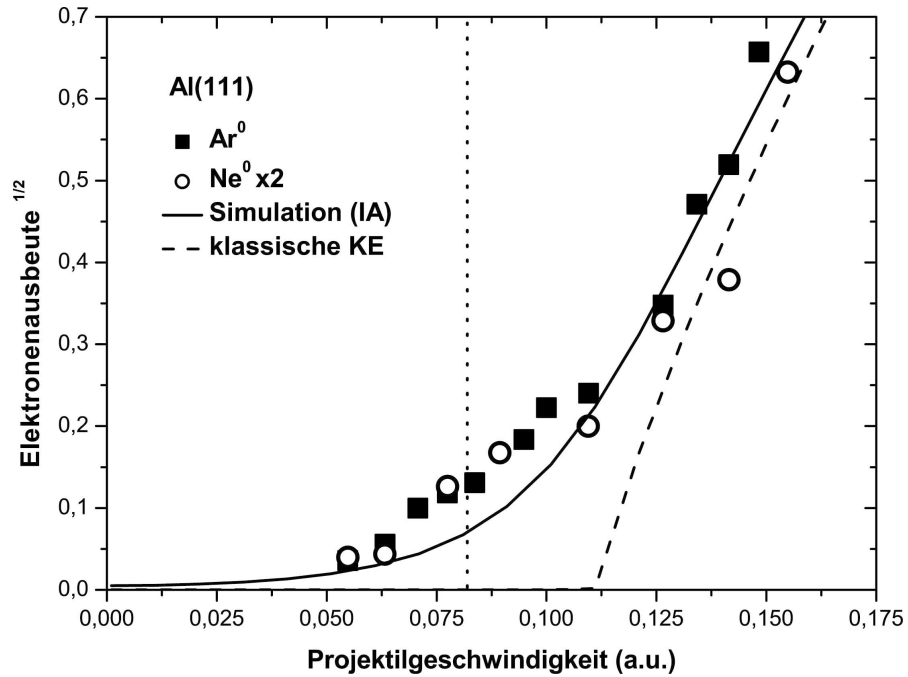


Abbildung 6.19: Quadratwurzeln der experimentellen Elektronenausbeuten bei der Streuung von Ar^0 und Ne^0 an $\text{Al}(111)$ unter $\Phi_{in} = 2,2^\circ$; durchgezogene Kurve: Simulation basierend auf der Impulsverteilung vor der Oberfläche [94], gestrichelte Kurve: Anpassung durch klassische KE, gestrichelte Kurve: v_{th} für die Elektronendichte im Festkörper

fallswinkel von $\Phi_{in} = 2,2^\circ$ dargestellt. Die Werte für die Streuung von Neon wurden für die Darstellung mit dem Faktor 2 multipliziert. Die durchgezogene Kurve in der Abbildung repräsentiert das Resultat der Simulationen basierend auf dem Compton-Profil vor der Oberfläche für die Streuung von Argonatomen [94]. Die Absolutwerte der Simulation wurden an das Experiment angepaßt. Die gestrichelte Kurve repräsentiert die Anpassung durch das klassische Schwellenverhalten der kinetischen Elektronenemission. Entscheidendes Resultat der Abbildung ist das theoretische Auftreten von Elektronenemission unterhalb der klassischen Schwelle.

Motiviert durch den Befund einer kinetischen Elektronenemission unterhalb der klassischen Schwelle als Folge des Compton-Profils wurden Experimente zur Streuung von Ar^0 an einer $\text{Al}(110)$ -Oberfläche durchgeführt. Dieser Kristall wurde aufgrund der Arbeiten von Canney et al. [93] gewählt. Dort wurde das Compton-Profil experimentell für drei Kristallrichtungen untersucht. In Abbildung 6.20 sind die Energiebänder und Impulsdichteverteilungen entlang der $[100]$ -, der $[110]$ - und der $[111]$ -Richtung aus [93] dargestellt. Anzumerken bleibt, dass es sich in Abbildung 6.20 um Ergebnisse für das Volumen des Kristalls handelt. Deutlich erkennbar ist das Ausschmieren der Impulsverteilungen für die $[100]$ - und die $[110]$ -Richtung. Für die $[111]$ -Richtung hat das Compton-Profil jedoch eine scharfe Kante beim theoretischen Wert des Fermi-Impulses ($k_F^{theo} = 0,93$ a.u.) von Aluminium. Eine scharfe Impulsverteilung sollte zur Folge haben, dass die Elektronenemission

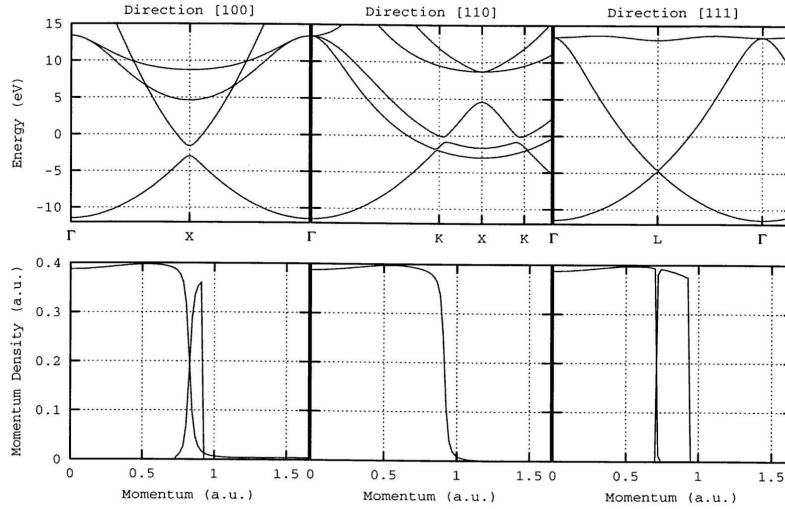


Abbildung 6.20: Energiebänder und Impulsdichteverteilungen entlang der [100]-, der [110]- und der [111]-Richtung für Aluminium aus [93]

unterhalb der klassischen Schwelle für diese Richtung nicht auftritt. Al(110) unterscheidet sich gegenüber Al(111) durch die unterschiedlichen Elektronendichten vor der Oberfläche. Die drei von Canney et al. untersuchten Kristallrichtungen liegen aber nur in der Al(110)- und nicht in der Al(111)-Oberfläche vor², weshalb die Wahl für die Untersuchungen zum Compton-Profil auf diese Oberfläche fiel.

In Abbildung 6.21 sind die Quadratwurzeln der experimentellen Elektronenausbeuten bei der Streuung von Ar^0 an Al(110) als Funktion der Projektilgeschwindigkeit im Bereich der theoretischen Schwelle unter einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 2,9^\circ$ dargestellt. Die azimuthalen Orientierungen des Projektilstrahls entsprechen der $\langle 100 \rangle$ -, der $\langle 110 \rangle$ -, der $\langle 111 \rangle$ -Richtung und einer Random- (hoch indizierten) Richtung. Um mögliche Effekte, verursacht durch azimuthales Channeling (Kap. 7), zu vermeiden, wurden die Messungen wenige Grad neben den eigentlichen Kristallrichtungen durchgeführt. Für alle Orientierungen tritt Elektronenemission unterhalb der klassischen Schwelle (vertikale Linie in Abb. 6.21) auf. Ein Einfluß der von Canney et al. bestimmten Compton-Profile ist nicht nachweisbar. Als ein Beweis gegen die Beschreibung der Elektronenemission unterhalb der klassischen Schwelle über die Verbreiterung der Impulsdichteverteilungen ist dieses Resultat jedoch nicht zu werten. So kann die experimentelle Abweichung von der jeweiligen Kristallrichtung dafür sorgen, dass die in [93] bestimmten Compton-Profile nicht mehr zutreffen. Des Weiteren beschreiben die Daten in Abbildung 6.20 den Fall eines Festkörpers. In dieser Arbeit wurden die Elektronenausbeuten jedoch durch streifende Streuung an der Oberfläche untersucht, sodass die Präsenz der Oberfläche und darauf begründeter Symmetriebrüche die Impulsverteilung auch im Fall der $\langle 111 \rangle$ -Richtung verbreitern kann.

Ein weiterer wichtiger Punkt im Modell der Elektronenemission durch die Ver-

²präzise formuliert liegen nur Richtungen gleicher Symmetrie in der Al(110)-Oberfläche

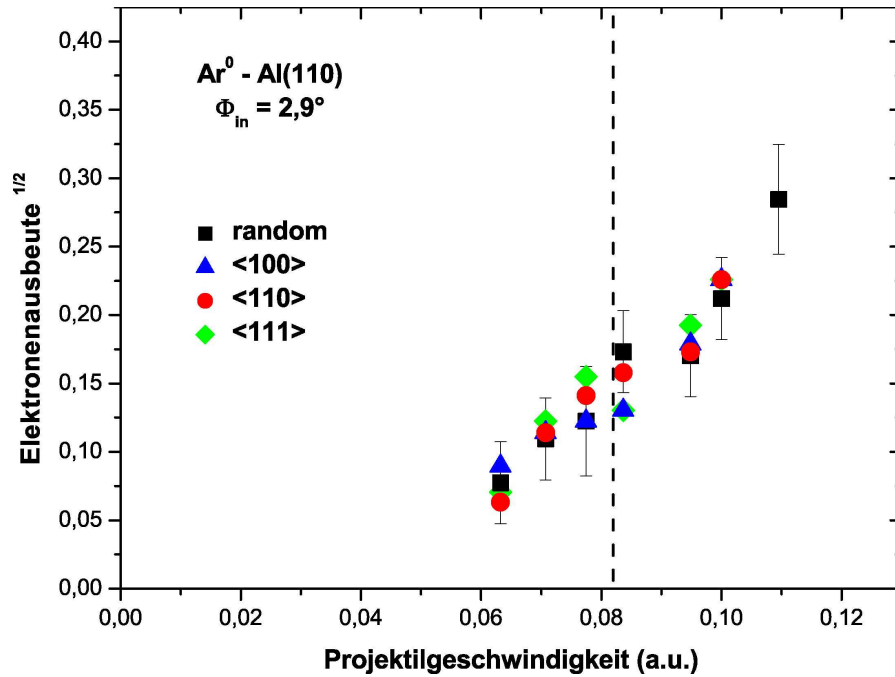


Abbildung 6.21: Quadratwurzeln der Elektronenausbeuten bei der Streuung von Ar^0 unter $\Phi_{in} = 2,9^\circ$ an $\text{Al}(110)$ entlang der $\langle 100 \rangle$ -, der $\langle 110 \rangle$ -, der $\langle 111 \rangle$ - und einer Random-Richtung

breiterung der Impulsdichteverteilung ist, dass es sich noch immer um eine binäre Wechselwirkung handelt. Obwohl das emittierte Elektron vor dem Stoß mit dem Projektil einen Impuls hat, der höher ist als klassisch erlaubt, muß das Projektil diesem Elektron genügend Energie übertragen, dass es den Festkörper verlassen kann. Aufgrund der kleinen Elektronenausbeuten unterhalb der klassischen Schwelle und der daraus folgenden geringen Anzahl von Wechselwirkungen zwischen Projektil und Elektron, die zur Elektronenemission führen, sollte die Verschiebung zwischen den Energieverlustspektren für Ereignisse ohne und mit Emission eines Elektrons mindestens der Austrittsarbeit der Oberfläche entsprechen. Für die Streuung von 3 keV Ne^0 und 5 keV Ar^0 an $\text{Al}(111)$ (siehe Abbildung 6.15) ist dies gegeben. Ein analoges Spektrum für die Streuung von 4 keV Ar^0 an $\text{Al}(111)$ unter dem gleichen Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 2,2^\circ$ ist in Abbildung 6.22 dargestellt. Analog zu Abbildung 6.15 repräsentieren die Quadrate Streueignisse, die nicht mit der Emission von Elektronen verbunden sind, und die offenen Kreise diejenigen, die in Koinzidenz mit einem emittierten Elektron auftreten. Die durchgezogene Kurve entspricht einer Glättung der experimentellen Daten ohne Elektronenemission aber mit einer energetischen Verschiebung um die Austrittsarbeit. Bei der Betrachtung des Spektrums fällt auf, dass zwar eine Verschiebung erkennbar ist, diese jedoch deutlich unter der Austrittsarbeit liegt. In dem hier untersuchten Geschwindigkeitsbereich unterhalb der klassischen Schwelle treten die systematischen Fehler durch das Experiment besonders hervor (Kap. 3.4) und sind bei der Auswertung der Elektronenausbeuten zu beachten. Die Probleme dabei sind in der

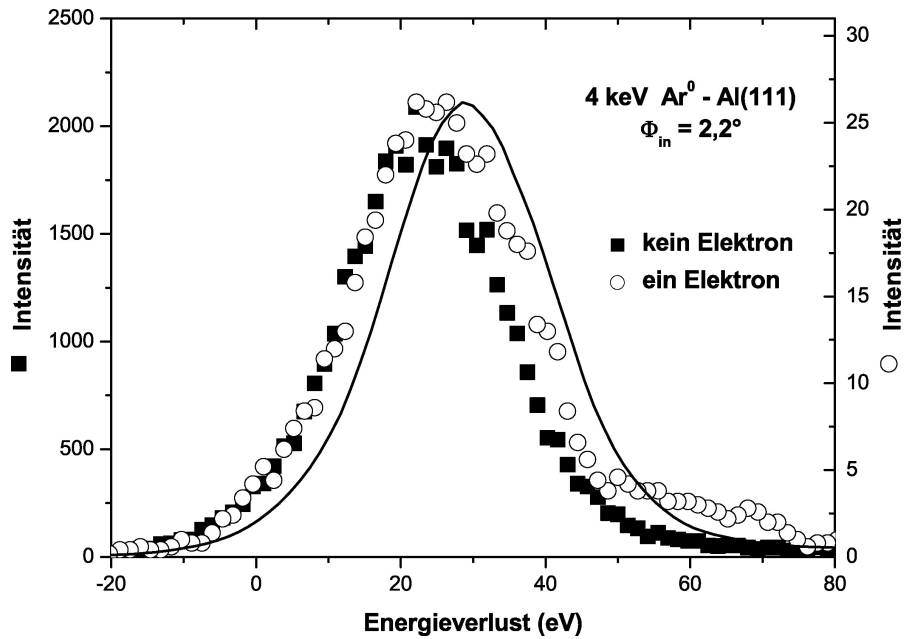


Abbildung 6.22: Energieverlustspektren für die Emission von keinem und einem Elektron bei der Streuung von 4 keV Ar^0 an $\text{Al}(111)$ unter $\Phi_{in} = 2,2^\circ$

Erzeugung der Teilchenpakete begründet. Werden mehrere Projektile gleichzeitig gestreut, wird die Zuweisung der Anzahl emittierter Elektronen zum nachgewiesenen Projektil unzuverlässig und muß korrigiert werden. Ist die Verschiebung zwischen den Energieverlustspektren benachbarter Elektronenzahlen groß genug, also mindestens W , sind mit sehr hoher Wahrscheinlichkeit dem Projektil korrekte Werte für Energieverlust und Elektronenzahl zugeordnet worden. Eine geringere Verschiebung kann entweder eine physikalische Ursache haben oder experimentell bedingt sein. Zur Verdeutlichung dieses Problems sei der Effekt der gleichzeitigen Streuung von zwei Projektilen erläutert. Durch die begrenzte Zeitauflösung des CEM wird bei der gleichzeitigen Streuung zweier Teilchen nur das schnellere der beiden nachgewiesen. Für die kinetische Emission von Elektronen ist es notwendig, dass das Projektil Energie auf das Elektron überträgt, wodurch es langsamer wird. Dementsprechend wird im Experiment nur das Projektil nachgewiesen, welches weniger Elektronen emittiert. Das Nachweisfenster der Elektronen ist aber so groß, dass die Elektronen beider Projektilen registriert werden und damit dem nachgewiesenen Projektil eine zu hohe Elektronenausbeute zugeordnet wird. Durch Störungen der Oberfläche wird dieser Effekt an der kinetischen Schwelle verstärkt. In diesem Regime ist die Zahl der Projektilen, die im klassischen Sinne Elektronen emittieren, sehr gering. Durch Stufenkanten werden Emissionskanäle wie Elektronenpromotion, die nicht dem Prinzip des binären Stoßes zwischen Atom und Elektron folgen, gefördert. Werden die beiden Atome also unterschiedlich gestreut, das nachgewiesene spekulär und das zweite in einem harten Stoß an einem Targetatom, emittiert letzteres mit hoher Wahrscheinlichkeit ein Elektron, das nachgewiesene, spekulär gestreute, Atom jedoch keines. Experimentell wird das

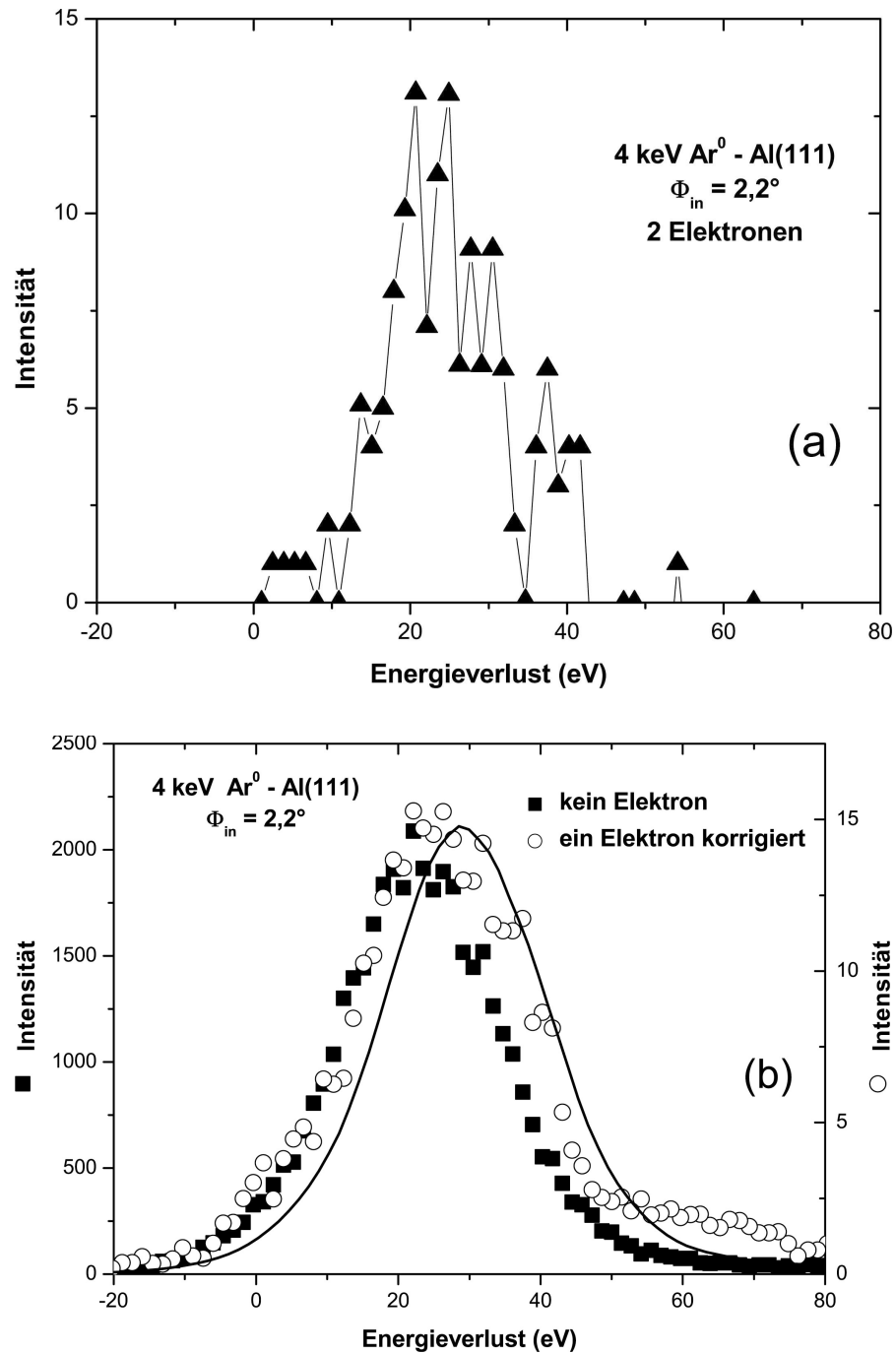


Abbildung 6.23: (a) Energieverlustspektrum für Projektile koinzident mit der Emission von zwei Elektronen bei der Streuung von 4 keV Ar^0 an Al(111) unter $\Phi_{\text{in}} = 2,2^\circ$; (b) Abbildung 6.22 jedoch mit korrigiertem Spektrum für die Emission eines Elektrons

Elektron dem Projektil zugeschrieben, das in Wirklichkeit gar kein Elektron emittiert hat. Ein Hinweis für das Auftreten dieser Problematik bietet das Signal für die Emission zweier Elektronen. In der Nähe der klassischen Schwelle sollten derartige

Ereignisse nicht stattfinden. In Abbildung 6.23 (a) ist das Energieverlustspektrum für Projektile, die zwei Elektronen emittieren, bei der Streuung von 4 keV Ar^0 an $\text{Al}(111)$ unter $\Phi_{in} = 2,2^\circ$ dargestellt. Die energetische Verschiebung zum Spektrum ohne Elektronenemission in Abbildung 6.22 beträgt 0 eV. Dies hat zur Folge, dass es sich um Elektronen handelt, die auf Streuprozesse mit mehreren Projektilen zurückgeführt werden. Durch die statistischen Abschätzungen in Kapitel 3.4 lassen sich die Spektren korrigieren. Die durch Anpassung mittels Gaußverteilungen bestimmten experimentellen Anteile $W_{ie^-}^{exp}$ für die Emission von i Elektronen betragen in dem beschriebenen Fall der Streuung von 4 keV Ar^0 $W_{0e^-}^{exp} = 55509$, $W_{1e^-}^{exp} = 1004$ und $W_{2e^-}^{exp} = 172$. Nach der Korrektur durch Gleichung 3.7 mit den empirisch bestimmten Wahrscheinlichkeiten P_{2Pr} und P_{2Pr}^- folgen Anteile von $W_{0e^-} = 56348$, $W_{1e^-} = 342$ und $W_{2e^-} = 5$. Die Elektronenausbeute reduziert sich damit vom experimentellen Wert $\gamma_{exp} = 0,0238$ zu $\gamma = 0,006$. In Abbildung 6.23 (b) sind die korrigierten Energieverlustspektren für die Emission von keinem und einem Elektron dargestellt. Die Verschiebung des Spektrums für die Emission eines Elektrons steigt im Vergleich zu Abbildung 6.22 leicht an, erreicht aber noch immer nicht die Austrittsarbeit, die durch das um W verschobene und geglättete Spektrum ohne Elektronenemission (durchgezogene Kurve in der Abbildung) repräsentiert wird. Wie erwähnt, sollte die Verschiebung auch im Modell der kinetischen Elektronenemission unterhalb der klassischen Schwelle, bedingt durch das Compton-Profil vor der Oberfläche, mindestens W betragen. Abbildung 6.23 (b) ist ein Hinweis auf einen weiteren, zu Elektronenemission führenden, Prozess in diesem Geschwindigkeitsregime.

Da die beobachtete energetische Verschiebung nicht der Austrittsarbeit entspricht, muß es sich dabei um einen Prozess handeln, bei dem mehr als ein Elektron beteiligt ist. Bei der Passage des Projektils durch das Elektronengas vor der Oberfläche, verliert dieses durch Stöße mit den Elektronen Energie. Die Elektronen werden energetisch angeregt, und es entstehen Elektron-Loch-Paare. Werden zwei benachbarte Elektronen so angeregt, dass die Summe des Energieübertrags vom Projektil auf die Einzelelektronen größer als die Austrittsarbeit ist, besteht die Möglichkeit, dass durch eine Auger-Abregung eines der beiden Elektronen emittiert wird. Voraussetzung dafür ist, dass das zuerst angeregte Elektron solange in diesem Zustand bleibt, bis das zweite ebenfalls einen energetisch höheren Zustand einnimmt. Dementsprechend hoch muß die Lebensdauer dieser „heißen“ Elektronen sein.

In Abbildung 6.24 sind die unterschiedlichen Emissionsmechanismen bei denen ein bzw. zwei benachbarte Elektronen beteiligt sind skizziert. Im Ein-Elektronen-Bild (Abb. 6.24 (a)) verliert das Projektil durch einen binären Stoß mit dem Elektron Energie. Ist der Energieübertrag auf ein Fermi-Elektron dabei kleiner als die Austrittsarbeit, wird das Elektron innerhalb des Festkörpers angeregt (1). Bei Energieüberträgen größer W kann es zur Elektronenemission kommen (2). Sind bei dem Streuprozess zwei Elektronen beteiligt (Abb. 6.24 (b)), so werden im Falle der Elektronenemission beide Elektronen innerhalb des Festkörpers mit Endzustandsenergien kleiner $(E_F + W)$ angeregt (1). Durch einen Augerprozess geht eines der Elektronen wieder in einen unbesetzten Zustand mit $E \leq E_F$ über. Die dabei

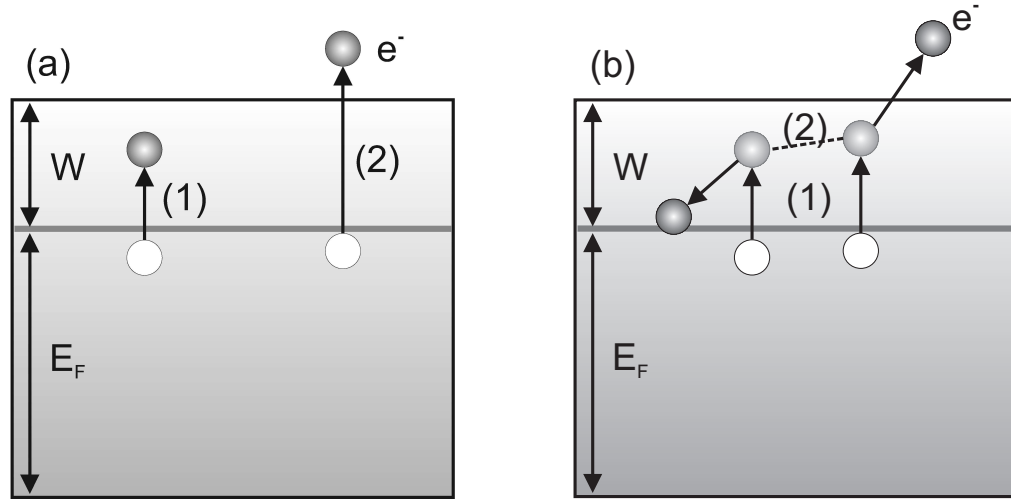


Abbildung 6.24: Schematische Darstellung der Wechselwirkung eines Projektils mit: (a) einem Elektron (1) Energieverlust (2) Energieverlust und Elektronenemission; (b) zwei Elektronen (1) Energieverlust (2) Auger-Abregung der Elektronen mit Elektronenemission

freiwerdende Energie wird auf das zweite Elektron übertragen, welches emittiert werden kann (2). Sind E_1 und E_2 die Energien der Elektronen im angeregten Zustand, so muß für eine mögliche Elektronenemission $E_1 + E_2 - 2E_F > W$ erfüllt sein.

Eine weitere Bedingung für einen Prozess der simultanen Anregung zweier Elektronen ist die Lebensdauer τ des zuerst angeregten Elektrons. Diese muß so groß sein, dass das erste Elektron genügend lange in dem angeregten Zustand verweilt, bis ein zweites Elektron angeregt wird. Die interatomaren Abstände der Al(111)-Oberfläche liegen im Bereich von $d = a/\sqrt{2}$, mit a als Gitterkonstante. Daraus folgt bei einer Projektilgeschwindigkeit v für die Zeit zwischen zwei Stößen an benachbarten Atomen $\tau_{WW} = d/v$. Für Argonatome im Energiebereich von $E = 2$ keV bis $E = 10$ keV ergeben sich Wechselwirkungszeiten zwischen $\tau_{WW} = 2,9$ fs und $\tau_{WW} = 1,3$ fs. Diese Zeiten liegen unterhalb der typischen Lebensdauern „heiße“ Elektronen in Aluminium [91], sodass die zeitliche Bedingung für Elektronenemission unterhalb der klassischen Schwelle durch simultane Anregung zweier Elektronen erfüllt ist.

Neben der zeitlichen Bedingung bleibt zu klären, ob es unterhalb der klassischen Schwelle für kinetische Elektronenemission möglich ist, zwei Elektronen so anzuregen, dass auch die energetische Forderung erfüllt wird. Um dies zu überprüfen wurden Simulationen zur Bestimmung von Energieverlust und Elektronenemission basierend auf differentiellen Streuquerschnitten für die Elektron-Atom-Streuung durchgeführt. Aufgrund der großen Bedeutung dieser Rechnungen für die Diskussionen zur Elektronenemission unterhalb der klassischen Schwelle wird das Prinzip dieser Simulationen detaillierter beschrieben. Da sich die Geschwindigkeiten von Atom (v_p) und Elektron (v_e) um ca. eine Größenordnung unterscheiden, wird im

Folgenden von einem ruhenden Projektil ausgegangen, an dem das Elektron mit dem Impuls $k = v_p + v_e$ gestreut wird. Aus den differentiellen Streuquerschnitten $d\sigma/d\Omega(\Theta)$ für Elektronenimpulse k (Berechnung siehe Gleichung 5.22 und 5.23) werden Wahrscheinlichkeiten für die Streuung des Elektrons in Winkelbereiche zwischen 0° und 180° berechnet. Zur Simulation des Energieverlustes werden N Elektronen am Projektil gestreut und dabei die Energieüberträge auf das Elektron unter Berücksichtigung der Wahrscheinlichkeiten für die Streuung in die Streuwinkel zwischen 0° und 180° aufsummiert. Der Energieübertrag ΔE_{tr} für die Streuung unter einem Winkel Θ ist

$$\Delta E_{tr}(\Theta) = \frac{1}{2} \left(\sqrt{v_p^2 \cos^2 \Theta + 2 \cdot v_p v_e + v_e^2} - v_p \cos \Theta \right)^2 - \frac{1}{2} v_e^2 . \quad (6.8)$$

Für eine hohe statistische Genauigkeit wurden für jedes Spektrum $1 \cdot 10^7$ Simulationen durchgeführt. Die gleichzeitige Anregung zweier Elektronen ging dahingehend ein, dass bei der n -ten Wechselwirkung die Anregungsenergie der $(n-1)$ -ten Wechselwirkung abgefragt wurde. Erfüllen die Gesamtenergien $E_1 = E(v_e) + \Delta E_{tr}(n-1)$ und $E_2 = E(v_e) + \Delta E_{tr}(n)$ die Bedingung $E_1 + E_2 - 2E_F \geq W$ wurde der Energieverlust nach N Wechselwirkungen der Emission eines Elektrons zugeschrieben und im anderen Fall dem Energieverlust ohne Elektronenemission. Um den eigentlichen Emissionsprozess und den Elektronentransport in die Simulationen einzubeziehen, wurden die Ereignisse mit Elektronenemission mit einer Emissionswahrscheinlichkeit P_{em} gewichtet. Zur Durchführung der Simulationen ist die Kenntnis der Energie der Elektronen, die mit dem Projektil wechselwirken, notwendig. Aus dem Einfallswinkel und der Projektilenergie läßt sich über das Wechselwirkungspotential mit der Oberfläche der Punkt der dichtesten Annäherung z_{min} bestimmen. Damit kann unter Verwendung von Abbildung 5.23 der maximale Elektronenimpuls ermittelt werden. Die Parameter N und P_{em} dienen zur Anpassung der Simulation an das Experiment.

In Abbildung 6.25 sind die differentiellen Streuquerschnitte $d\sigma/d\Omega$ für die Streuung von Elektronen mit Impuls $k = 0,8$ a.u. an Neon (a) und Impuls $k = 0,84$ a.u. an Argon als Funktion des Streuwinkels dargestellt. Die Streuphasen zur Berechnung von $d\sigma/d\Omega$ (Gleichung 5.22 und 5.23) für Ne^0 stammen aus [96], die für Ar^0 aus [58]. Die Elektronenimpulse entsprechen der Streuung von 3 keV Neon und 5 keV Argon. Zusätzlich sind in die Graphen die Energieüberträge auf die Elektronen nach Gleichung 6.8 und die Gesamtenergien der Elektronen nach der Wechselwirkung mit dem Projektil eingezeichnet. Deutlich zu erkennen ist, dass weder bei der Streuung von Neon noch bei der von Argon genügend Energie auf ein Elektron übertragen wird, damit es den Festkörper verlassen kann. Dieses Resultat ist in Übereinstimmung mit den klassischen Betrachtungen zur kinetischen Elektronenemission, da beide Projektilgeschwindigkeiten kleiner als die Schwellengeschwindigkeit sind.

In Abbildung 6.26 sind die aus den Streuquerschnitten in Abbildung 6.25 resultierenden Ergebnisse der Simulationen zu Energieverlust und Elektronenemission bei der Streuung von (a) 3 keV Neon und (b) 5 keV Argon dargestellt. Für den

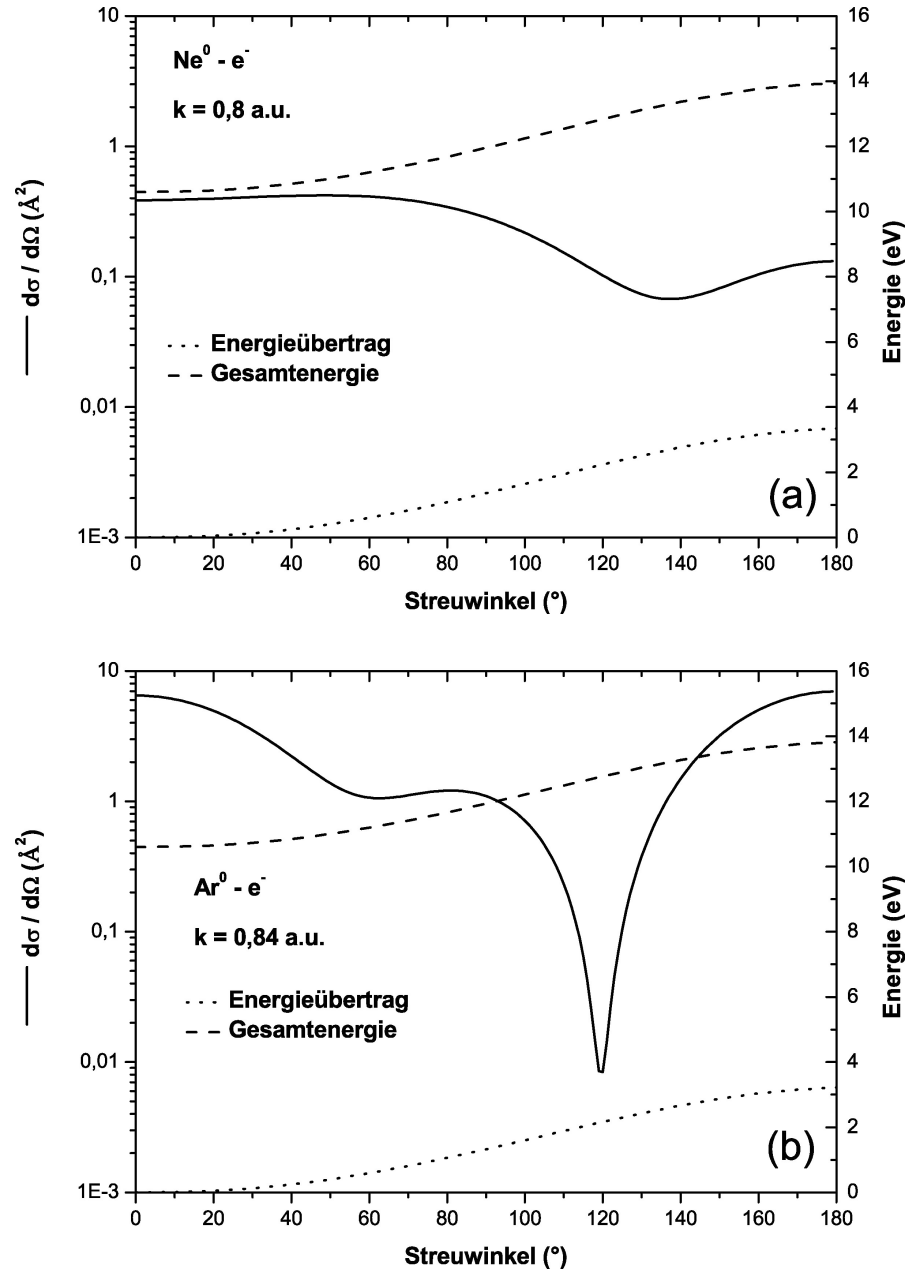


Abbildung 6.25: Differentieller Streuquerschnitt $d\sigma/d\Omega$, der Energieübertrag ΔE_{tr} auf das Elektron und die Gesamtenergie des Elektrons als Funktion des Streuwinkels für die Systeme (a) $\text{Ne}^0 - e^-$, $k = 0,8$ a.u. und (b) $\text{Ar}^0 - e^-$, $k = 0,84$ a.u.

experimentellen Energieverlust ist eine Wechselwirkungszahl von $N = 30$ für beide Projektile erforderlich. Die Emissionswahrscheinlichkeit ergibt sich zu $P_{em} = 1/90$. Wichtiges Resultat beider Simulationen ist, dass sowohl bei der Streuung von Neon als auch bei der von Argon Elektronen auch unterhalb der klassischen Schwelle für kinetische Elektronenemission emittiert werden können, wenn eine Korrelation zweier benachbarter Elektronen vorausgesetzt wird. Als weiteres Indiz für diesen

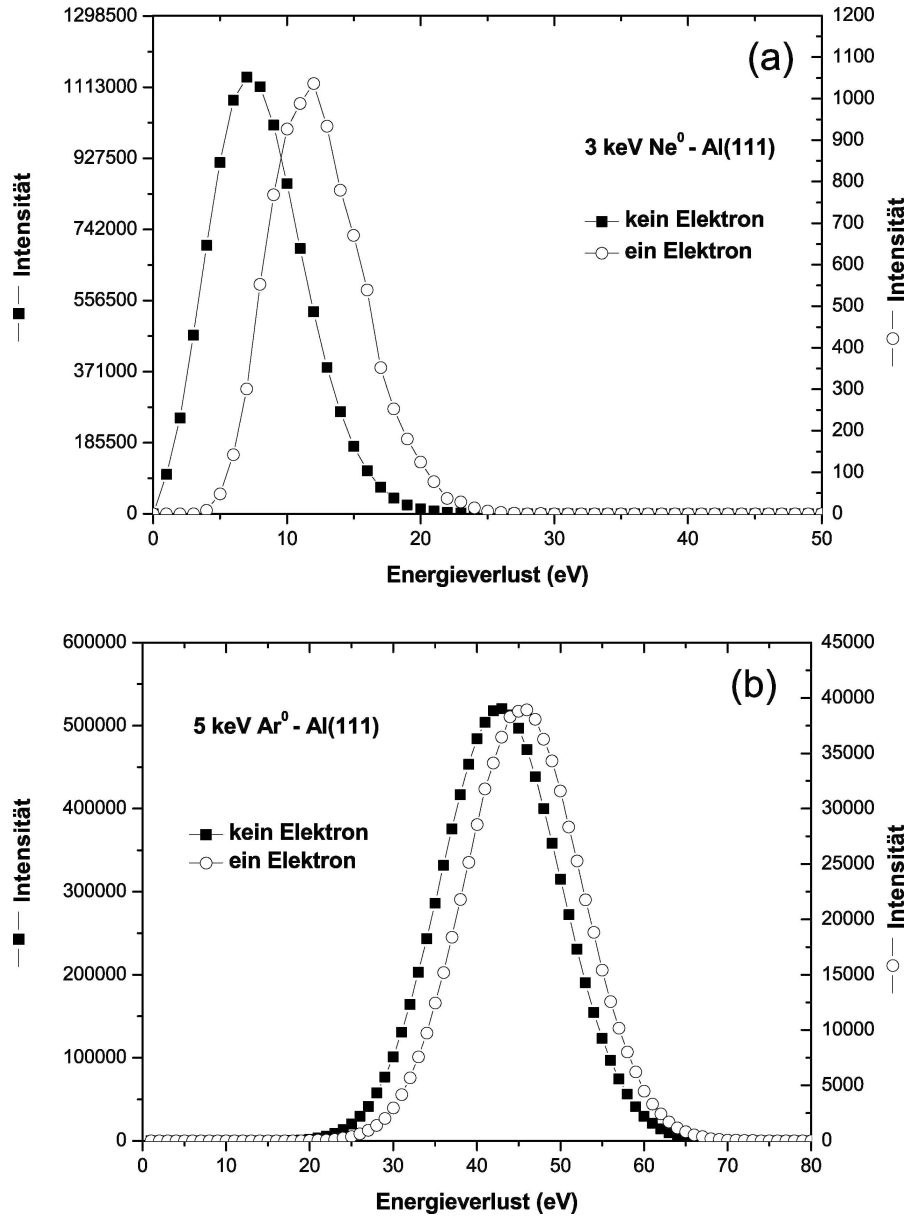


Abbildung 6.26: Simulierte Energieverlustspektren für die Emission von keinem und einem Elektron bei der Streuung von (a) 3 keV Ne^0 und (b) 5 keV Ar^0 an Al(111) für $1 \cdot 10^7$ Simulationen, $N = 30$ und $P_{em} = 1/90$

Prozess ist die Verschiebung zwischen den simulierten Spektren für die Emission von keinem und einem Elektron zu werten. In Abbildung 6.26 (b) (Ar^0) beträgt diese energetische Differenz ca. 2,7 eV und liegt damit unterhalb der Austrittsarbeit von $W = 4,3$ eV. Dieses Resultat stimmt nur bedingt mit den experimentellen Befunden überein, bei denen die Verschiebung annähernd der Austrittsarbeit entspricht. Da das Auftreten von Elektronenemission durch Wechselwirkung zweier angeregter Elektronen aber nicht als Ausschluß für die Emission, bedingt durch das Compton-Profil, sondern vielmehr als Ergänzung zu werten ist, könnte die

experimentelle Verschiebung auf eine mögliche Mischung beider Prozesse zurückzuführen sein. Im Fall der Streuung von Neon (Abbildung 6.26 (a)) ist zwischen den simulierten Spektren für die Emission von einem bzw. keinem Elektron eine energetische Verschiebung von ca. 4,3 eV erkennbar. Dieser Wert stimmt mit der Austrittsarbeit der Al(111)-Oberfläche überein und liegt über der Verschiebung für die Simulationen zur Streuung von Argon. Die Ursachen dafür können verschiedener Herkunft sein und sind im Wesentlichen in der Statistik und dem Verlauf des differentiellen Streuquerschnitts begründet. Mit Statistik ist im vorliegenden Fall die sehr geringe Anzahl emittierter Elektronen gemeint. Dadurch sind Streuprozesse mit ausreichendem Energieübertrag auf die beteiligten Elektronen sehr selten. Sowohl das Experiment als auch die Simulation sind damit sehr sensitiv auf Ereignisse mit maximalem Energieübertrag, sodass der energetische Unterschied zwischen den Spektren ansteigt.

Der im Mittel zusätzliche Energieverlust für die Emission eines Elektrons liegt bei der Streuung von 4 keV Ar^0 an Al(111) (Abbildung 6.23) unter der Austrittsarbeit. In Abbildung 6.27 (a) sind der differentielle Streuquerschnitt sowie der Energieübertrag auf das Elektron und die Gesamtenergie des Elektrons als Funktion des Streuwinkels dargestellt. Die Streuphasen der Rechnungen für Elektronen mit einem Impuls $k = 0,8$ a.u. stammen aus [58]. Der Elektronenimpuls resultiert aus dem minimalen Abstand zur Oberfläche und dem daraus folgenden maximalen Impuls in diesem Abstand. In Abbildung 6.27 (b) sind die aus $d\sigma/d\Omega$ resultierenden Spektren bei der Streuung von 4 keV Ar^0 für Ereignisse ohne Elektronenemission und mit Emission eines Elektrons dargestellt. Für eine ausreichende Statistik wurden $1 \cdot 10^{-7}$ Simulationen mit $N = 15$ und $P_{em} = 1/90$ durchgeführt. Dabei wird eine gute Übereinstimmung mit dem experimentellen Energieverlustspektrum erzielt. Unter der Voraussetzung korrelierter Elektronenanregungen ist, wie schon im Fall der Streuung von 5 keV Ar^0 , Elektronenemission unterhalb der klassischen Schwelle zu beobachten. Die Verschiebung zwischen den beiden Spektren in Abbildung 6.27 beträgt nur noch 1,9 eV, was deutlich unter der Austrittsarbeit liegt und damit den experimentellen Wert reproduziert.

Zusammenfassend ergibt sich aus den auf den differentiellen Streuquerschnitten basierenden Simulationen, dass Elektronenemission unterhalb der klassischen Schwelle durch die Wechselwirkung von zwei gleichzeitig angeregten Elektronen möglich ist. Aus der Verschiebung der Spektren ist aber zu schließen, dass dieser Prozess nur als ein zusätzlicher Mechanismus zu dem basierend auf dem Compton-Profil vor der Oberfläche zu werten ist. Neben dem Unterschied in der energetischen Verschiebung zwischen Ereignissen mit und ohne Elektronenemission unterscheiden sich die Modelle basierend auf dem Compton-Profil und auf der Anregung und anschließenden Auger-Abregung zweier Elektronen in einem weiteren Aspekt. Im zweiten Fall ist es notwendig, dass die Summe der Anregungsenergien mindestens der Austrittsarbeit entspricht. Daraus resultiert für diesen Prozess, wie bei der klassischen kinetischen Elektronenemission (Kapitel 5.3.1), eine Schwelle, unterhalb der keine Emission stattfinden kann. Die Schwellengeschwindigkeit ergibt sich dabei aus dem gleichen Ansatz wie im klassischen Fall, nur das jetzt

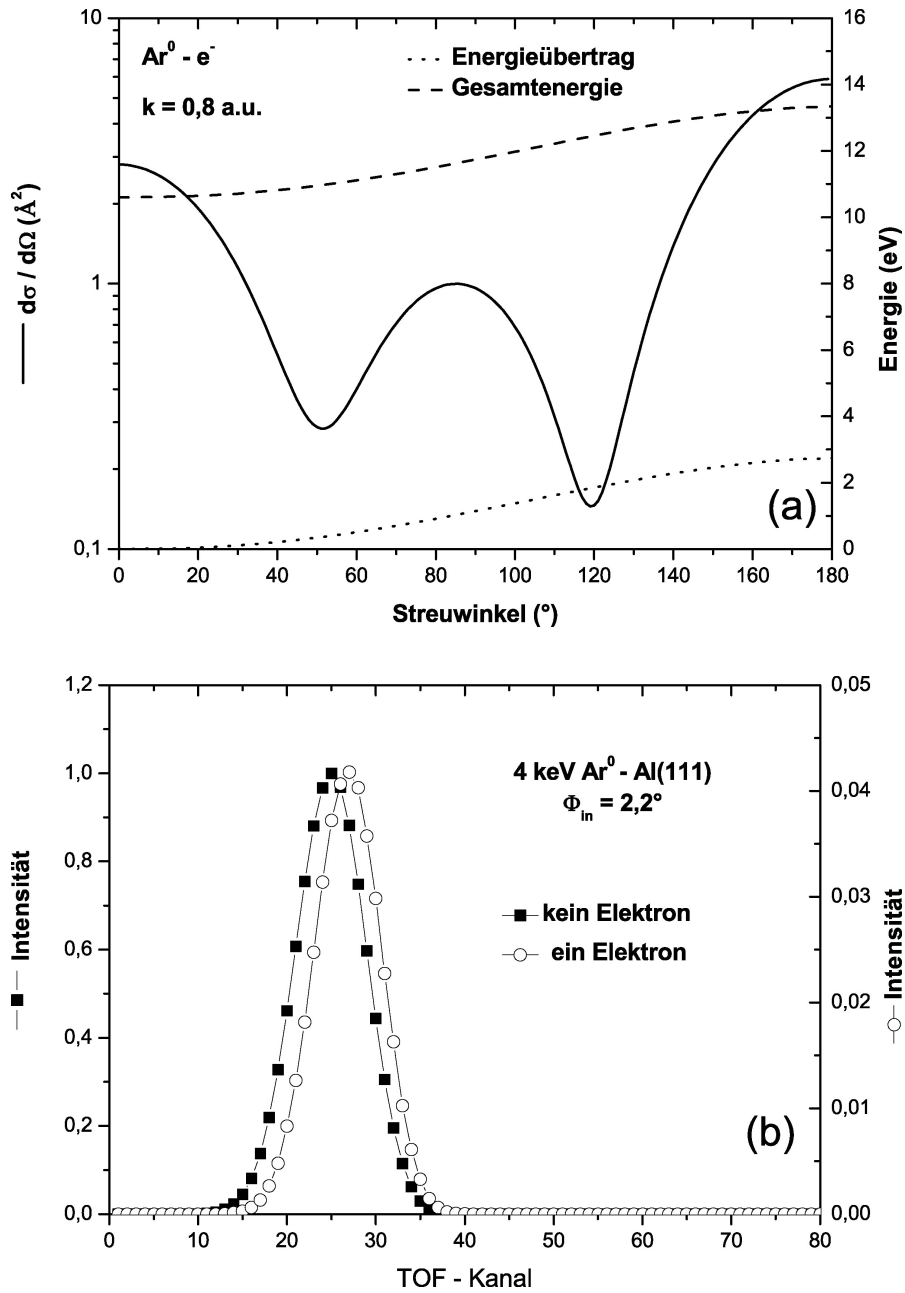


Abbildung 6.27: Differentieller Streuquerschnitt $d\sigma/d\Omega$, der Energieübertrag ΔE_{tr} auf das Elektron und die Gesamtenergie des Elektrons als Funktion des Streuwinkels (a) und simulierte Spektren für die Emission von keinem und einem Elektron (b) bei der Streuung von 4 keV Ar^0 unter $\Phi_{in} = 2,2^\circ$ für $1 \cdot 10^7$ Simulationen, $N = 15$ und $P_{em} = 1/90$

der Energieübertrag auf ein Fermi-Elektron mindestens der halbem Austrittsarbeit entsprechen muß.

$$v_{th}^{2e^-} = \frac{v_F}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{W}{2E_F}} - 1 \right) \quad (6.9)$$

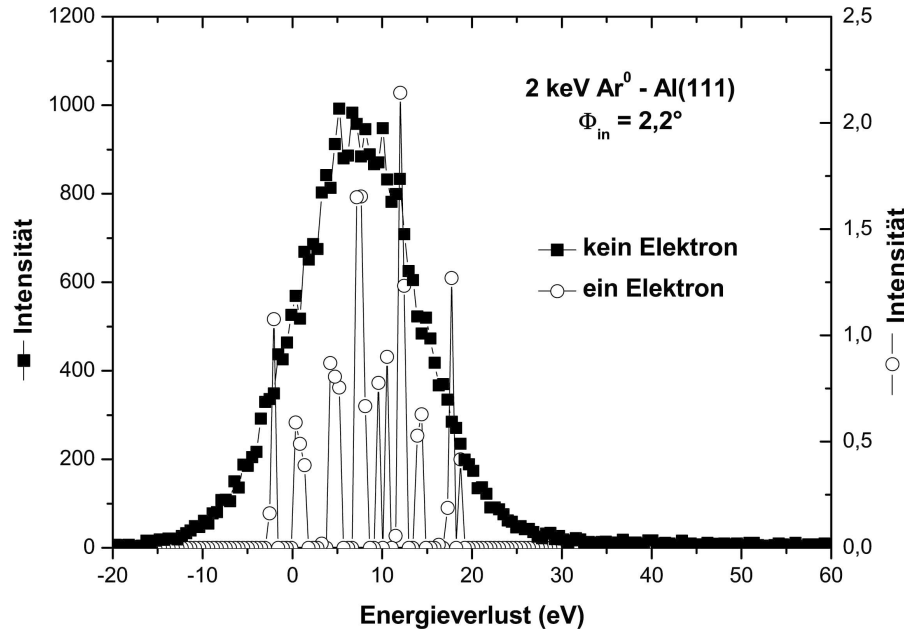


Abbildung 6.28: Energieverlustrspektrn für die Emission von keinem und einem Elektron bei der Streuung von 2 keV Ar^0 an Al(111) unter einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 2,2^\circ$

Aus Gleichung 6.9 folgt damit für ein Fermi-Elektron der Al(111)-Oberfläche eine theoretische Schwellengeschwindigkeit von $v_{th}^{2e^-} = 0,042$ a.u., was ca. dem halben Wert für die direkte Emission (siehe Tabelle 5.1) entspricht.

In Abbildung 6.28 sind die experimentell bestimmten Energieverlustrspektrn ko-
inzident für die Emission von keinem und einem Elektron bei der Streuung von 2
keV Ar^0 an Al(111) unter dem Einfallswinkel $\Phi_{in} = 2,2^\circ$ dargestellt. Die Spektrn
wurden analog zur Streuung von 4 keV Ar^0 korrigiert. Die Elektronenausbeute
beträgt $\gamma = 2 \cdot 10^{-4}$ und ist nahe der Auflösungsgrenze des experimentellen Auf-
baus. Die relativ schlechte Statistik im Ein-Elektronen-Signal liegt an der geringen
Zahl der Koinzidenzen. Im vorliegenden Fall wurden 5,6 Koinz./s im gestreuten
Strahl erzielt. Daraus folgt unter Extrapolation der Elektronenausbeute, dass ca.
alle 1000 s ein Elektron nachgewiesen wird. Die Meßzeit betrug annähernd 120
min, was für den verwendeten Aufbau am Limit der Strahlstabilität liegt. In Ab-
bildung 6.29 sind (a) der differentielle Streuquerschnitt (Streuphasen aus [58])
zusammen mit dem Energietransfer auf das Elektron und dessen Gesamtenergie
nach der Streuung und (b) die Ergebnisse aus den Simulationen zu Energieverlust
und Elektronenemission dargestellt. Übereinstimmung mit dem experimentellen
Energieverlust wurde bei $1 \cdot 10^7$ Simulationen für $N = 10$ Wechselwirkungen er-
zielt. Die Emissionswahrscheinlichkeit betrug $P_{em} = 1$. Wie der Abbildung zu
entnehmen ist, ist die Emission von Elektronen bei der Streuung von 2 keV Ar^0
($v = 0,045$ a.u.) auszuschließen. Dieses Resultat bestätigt sowohl das Experiment
als auch die Vorhersage einer Schwelle für die Elektronenemission, hervorgerufen
durch eine Auger-Wechselwirkung zweier angeregter Elektronen.

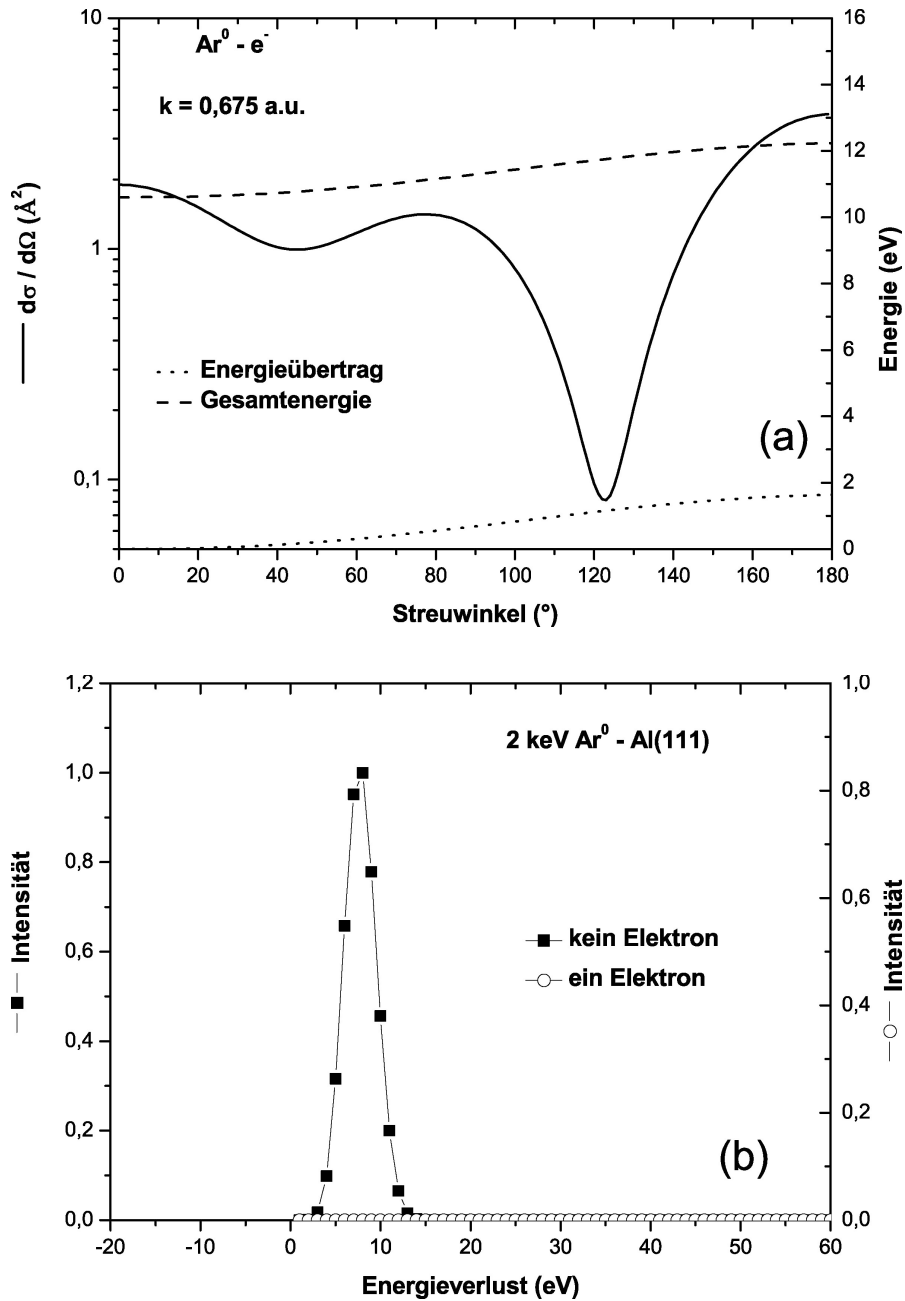


Abbildung 6.29: Differentieller Streuquerschnitt $d\sigma/d\Omega$, Energieübertrag ΔE_{tr} auf das Elektron und Gesamtenergie des Elektrons als Funktion des Streuwinkels (a) und simulierte Spektren für die Emission von keinem und einem Elektron (b) bei der Streuung von 2 keV Ar^0 unter $\Phi_{in} = 2,2^\circ$ für $1 \cdot 10^7$ Simulationen, $N = 10$ und $P_{em} = 1$

Die Argumentationen zum Modell der Elektronenemission durch das Compton-Profil und der Auger-Abregung zweier gleichzeitig angeregter Elektronen erklären das Verhalten von Elektronenemission und Energieverlust unterhalb der klassischen Schwelle für Elektronenemission in den Abbildungen 6.12 und 6.13 bei der

Streuung von Neon und Argon. Ein weiteres Resultat ist das zwar im Energieverlust vergleichbare aber in der Elektronenemission unterschiedliche Verhalten bei der Streuung von Helium- und Neonatomen. Zur Klärung dieses Phänomens wurden wiederum Simulationen basierend auf den differentiellen Streuquerschnitten für das jeweilige System durchgeführt. Zur Anpassung der Simulationen an die experimentellen Energieverluste diente der Parameter N und an die Elektronenausbeuten der Parameter P_{em} . Im Folgenden wird der Fall der Streuung von Argon, Neon und Helium bei einer Projektilgeschwindigkeit von $v = 0,11$ a.u. diskutiert. Konnte bei den Betrachtungen zum Energieverlust unterhalb der klassischen Schwelle der nukleare Energieverlust vernachlässigt werden, so muß er aufgrund der höheren Projektilgeschwindigkeiten und Senkrechtenergien in dieser Diskussion berücksichtigt werden. Deutlich wird dies insbesondere für die Streuung von Neon und Argon. In Abbildung 6.30 sind die simulierten Spektren für den nuklearen Energieverlust bei der Streuung von Helium, Neon und Argon unter $\Phi_{in} = 2,2^\circ$ dargestellt. Die Durchführung der Simulationen erfolgte dabei analog zu der in Kapitel 6.1. Für Helium bleibt der nukleare Energieverlust vernachlässigbar, was auf die geringe Energie, den relativ großen Massenunterschied zu den Aluminiumatomen der Oberfläche und die, bedingt durch die geringe Senkrechtenergie von ca. 1,8 eV, großen Stoßparameter mit Werten über 3,3 a.u. zurückzuführen ist. Bei der Streuung von Ne^0 beträgt der wahrscheinlichste nukleare Energieverlust dahingegen 7,5 eV, bei Ar^0 sogar 15 eV. Diese Beträge sind bei experimentellen Energieverlusten von 22,4 eV respektive 98,2 eV nicht mehr vernachlässigbar und müssen durch eine geeignete Wahl der Wechselwirkungszahl N bei der Simulation des elektronischen Energieverlustes berücksichtigt werden.

Aufgrund der unterschiedlichen Senkrechtenergien der Projektile bei gleichem Einfallswinkel und äquivalenter Geschwindigkeit wechselwirken die Atome gerade im Umkehrpunkt der Trajektorie mit Elektronen verschiedener Energie. Unter den experimentellen Gegebenheiten beträgt der Impuls der streuenden Elektronen im Ruhesystem des jeweiligen Projektils für Helium $k = 0,62$ a.u., für Neon $k = 0,9$ a.u. und $k = 0,95$ a.u. für Argon. Die differentiellen Streuquerschnitte zusammen mit dem Energieübertrag ΔE_{tr} auf das Elektron und der Gesamtenergie des gestreuten Elektrons sind in Abbildung 6.31 (a) bis (c) als Funktion des Streuwinkels dargestellt. Die für die Berechnung von $d\sigma/d\Omega$ über die Streuamplitude nach Gleichung 5.23 notwendigen Streuphasen stammen für Helium aus [97], für Neon aus [96] und für Argon aus [58]. Im Bereich großer Streuwinkel ist bei allen Projektile der Energieübertrag ausreichend, um Elektronen über $E_F + W$ anzuregen. Der differentielle Streuquerschnitt in diesem Winkelbereich ist für Argon um fast eine Größenordnung höher als für Helium und Neon, was als Hinweis auf die deutlich höhere Elektronenausbeute bei der Streuung von Argon zu werten ist. In Abbildung 6.32 werden experimentelle Ergebnisse und Simulationen zum Energieverlust für (a) 1,25 keV Helium, (b) 6 keV Neon und (c) 12 keV Argon dargestellt. Die offenen Kreise zeigen das Resultat der Simulation für den elektronischen Energieverlust. Dabei wurde für He^0 die Wechselwirkungszahl $N = 45$ und für Ne^0 und Ar^0 $N = 48$ gewählt. Die geringere Wechselwirkungszahl bei der

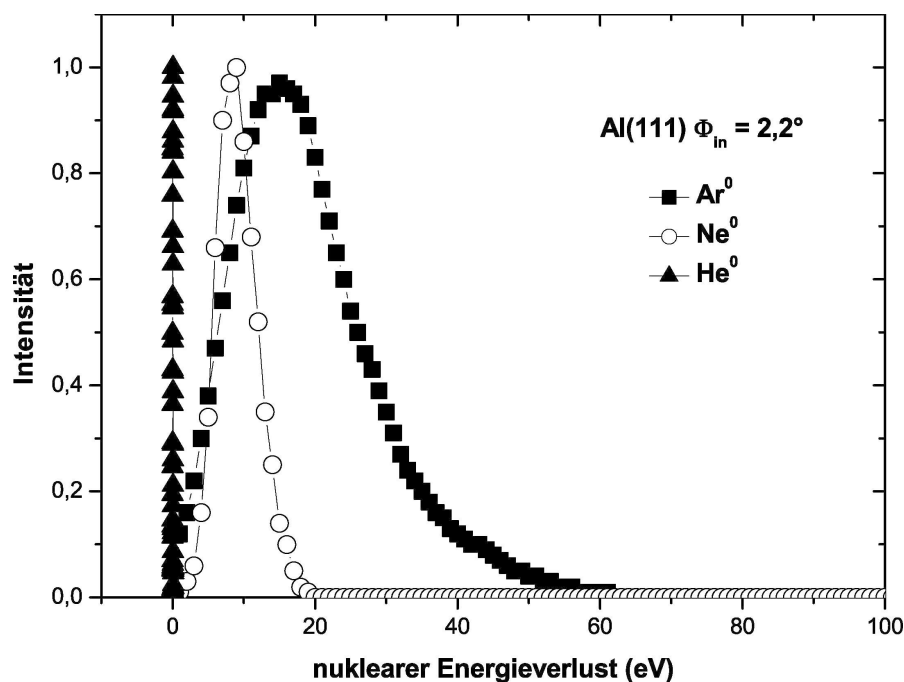


Abbildung 6.30: Simulierte nukleare Energieverlustspektren bei der Streuung von 1,25 keV He⁰, 6 keV Ne⁰ und 12 keV Ar⁰ an Al(111) unter einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 2,2^\circ$

Simulation für Helium wird durch den Vergleich der Senkrechtereignisse der Projektile und der daraus resultierenden dichtesten Annäherung an die Oberfläche gerechtfertigt. Zusätzlich ist in den Darstellungen der simulierte nukleare Energieverlust abgebildet. Wie erwähnt, setzt sich der experimentelle Energieverlust (volle Quadrate in Abb. 6.32) aus dem elektronischen und dem nuklearen Anteil zusammen. Um dies in den Rechnungen zu berücksichtigen, wurden für die drei Projektile die Resultate der Simulationen mit den energetischen Verteilungen der direkten Strahlen gefaltet. Die Ergebnisse werden durch die offenen Quadrate in den Grafiken repräsentiert. Für alle Projektile wird eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten erzielt. Die Breite der Verteilungen ist jedoch in allen Fällen kleiner als gemessen. Aufgrund des Ansatzes in den Simulationen, dass die Wechselwirkung am Umkehrpunkt der Trajektorie und den dort anzutreffenden Elektronen betrachtet wird, ist dies aber nicht überraschend. Im experimentellen Fall wechselwirken die Projektile auf ihrem Weg zum und vom Umkehrpunkt weg mit Elektronen geringerer Energie. Zwar ist der maximal mögliche Energietransfer auf diese Elektronen sowie ihre Dichte geringer, trotzdem sollten derartige Streueignisse einen Einfluß auf die Energieverlustverteilung haben. Ein weiterer Punkt, der durch das Experiment bedingt ist, bleibt in den Simulationen ebenfalls unberücksichtigt. Zwar wurde in die Rechnungen die energetische Verteilung der direkten Strahlen einbezogen, der Einfluß der geometrischen Divergenz fehlt jedoch. Durch diese räumliche Verteilung werden einige Projektile unter etwas kleinerem und andere unter etwas größerem Einfallswinkel gestreut. Diese Projektile haben

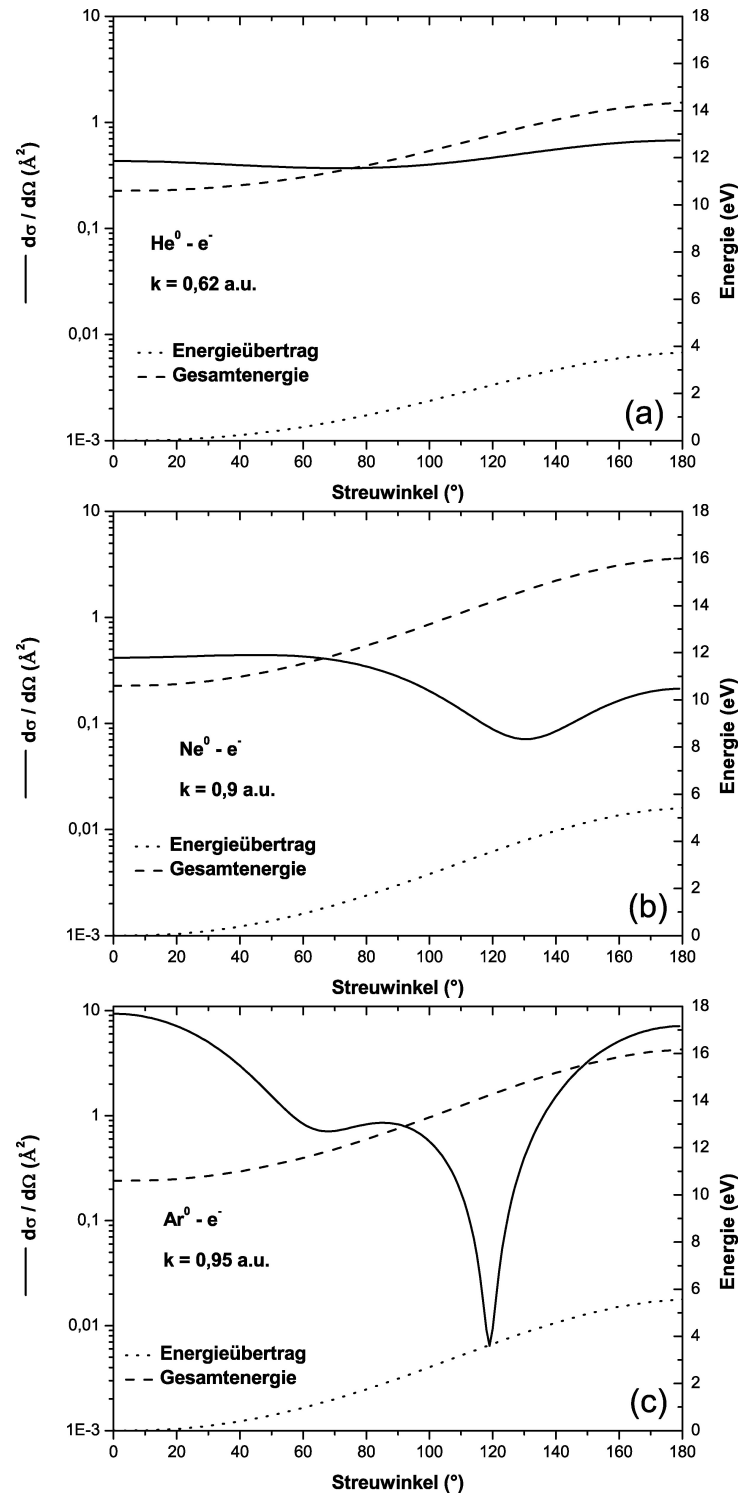


Abbildung 6.31: Differenzieller Streuquerschnitt, der Energieübertrag auf das Elektron und die Gesamtenergie des Elektrons als Funktion des Streuwinkels für die Streuung von (a) 1,25 keV He^0 , (b) 6 keV Ne^0 und (c) 12 keV Ar^0

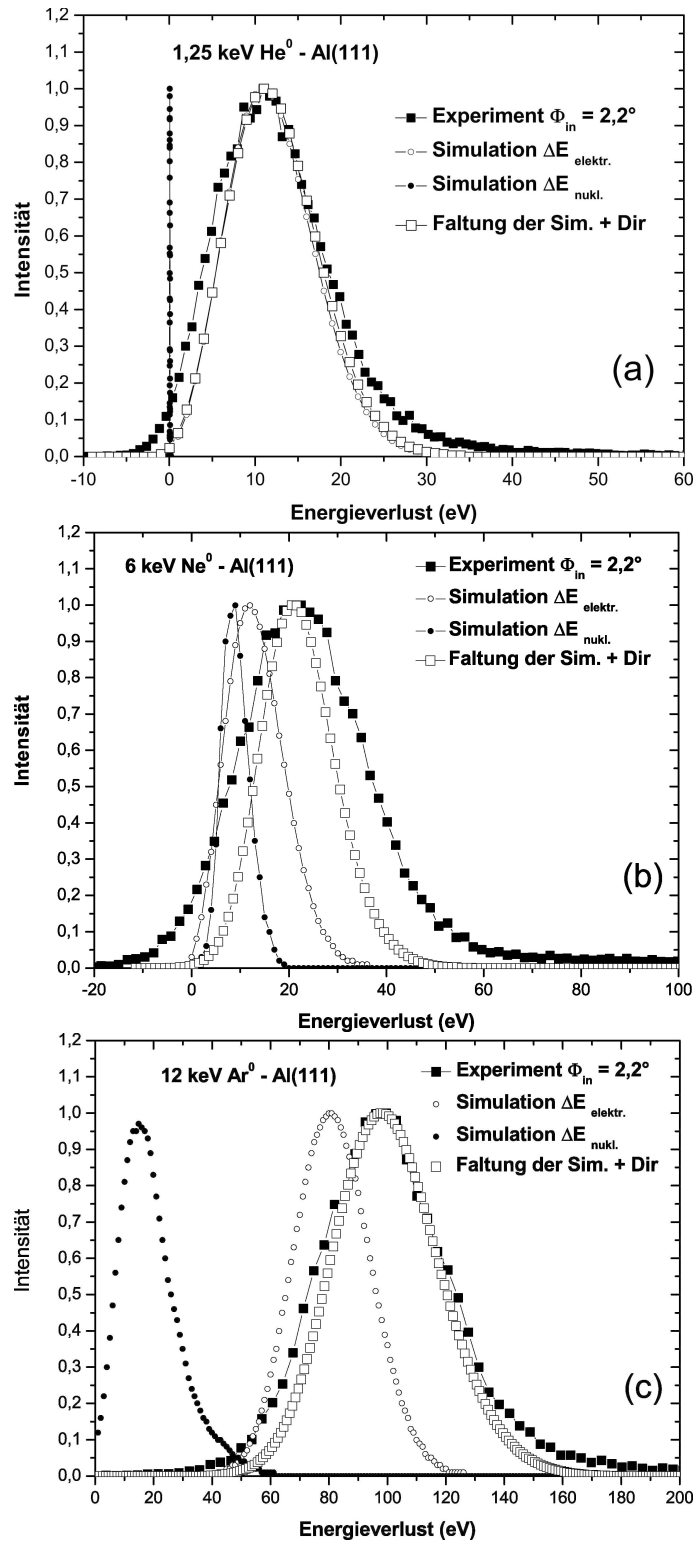


Abbildung 6.32: Simulierte und experimentelle Energieverlustspektren, Verteilungen des nuklearen Energieverlustes und Faltung für Ereignisse ohne Elektronenemission bei der Streuung von (a) 1,25 keV He⁰, (b) 6 keV Ne⁰ und (c) 12 keV Ar⁰ (Details siehe Text)

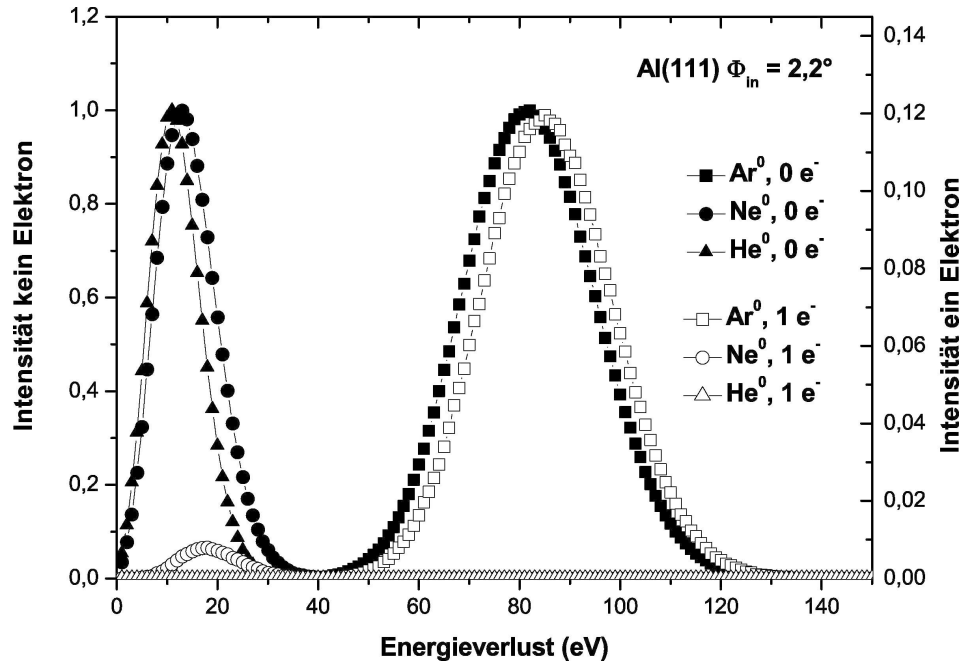


Abbildung 6.33: Simulierte Energieverlustspektren für die Emission von keinem und einem Elektron bei der Streuung von $v = 0,11$ a.u. He^0 , Ne^0 und Ar^0 an $\text{Al}(111)$ unter $\Phi_{in} = 2,2^\circ$; $1 \cdot 10^7$ Simulationen, $P_{em} = 1/90$ und $N = 45$ für He^0 sowie $N = 48$ für Ne^0 und Ar^0

keinen Einfluß auf den mittleren Energieverlust, da dieser durch das Maximum im Strahlprofil (entspricht dem makroskopisch eingestellten Einfallswinkel) bestimmt wird. Die Projektile mit Einfallswinkeln größer Φ_{in} verlieren mehr Energie, die mit kleiner Φ_{in} weniger. Damit werden die hoch- bzw. niederenergetischen Flanken in der experimentellen Verteilung erhöht, was zu einer Verbreiterung des Spektrums führt.

Nachdem die Wechselwirkungszahlen N für die Simulationen durch Abbildung 6.32 festgelegt sind, bleibt die Frage nach der Elektronenausbeute zu klären. Zur zusätzlichen Berücksichtigung der Elektronenausbeute bei der Simulation des Energieverlustes wurde für alle Projektile eine Emissionswahrscheinlichkeit $P_{em} = 1/90$ gewählt. Die sich daraus ergebenden Energieverlustspektren bei der Emission von keinem oder einem Elektron sind in Abbildung 6.33 dargestellt. Die Dreiecke repräsentieren die Streuung von Helium, die Kreise die von Neon und die Quadrate die von Argon. Ereignisse ohne Elektronenemission werden durch ausgefüllte und Ereignisse mit Elektronenemission durch offene Symbole repräsentiert. Wichtigstes Resultat ist der Befund, dass Helium- und Neonatome zwar vergleichbar viel Energie verlieren, bei der Streuung von He^0 jedoch keine Elektronenemission auftritt. Die experimentell bestimmte höhere Elektronenausbeute von Argonatomen im Vergleich zu Neonatomen wird ebenfalls durch die Rechnungen bestätigt.

Nach dem Vergleich der Elektronenemission bei der Streuung von Helium-, Neon-

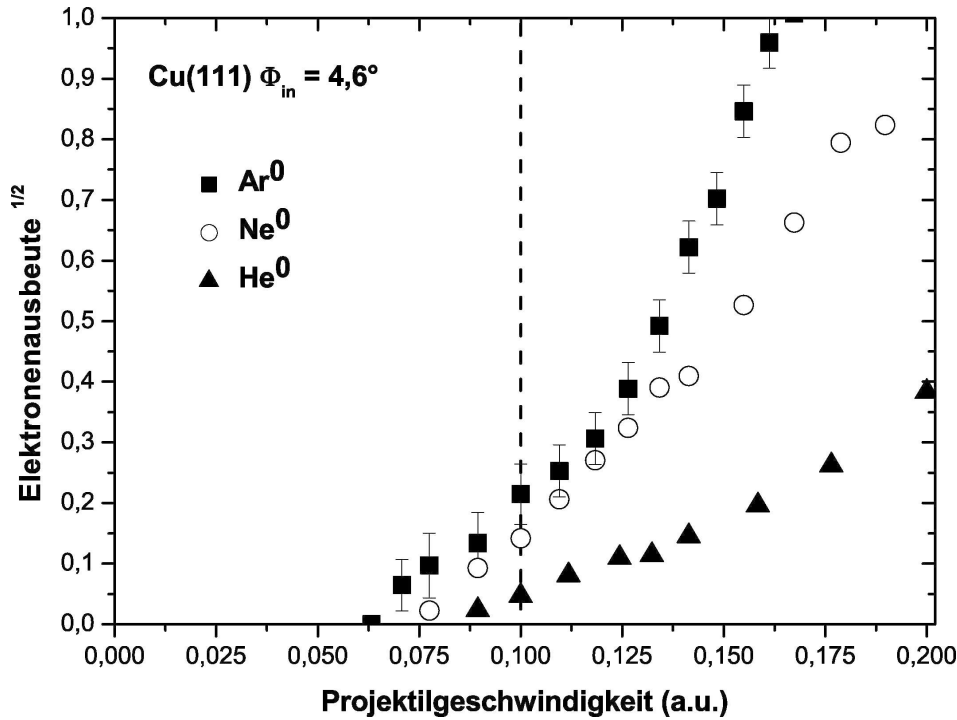


Abbildung 6.34: Quadratwurzeln der Elektronenausbeuten bei der Streuung von He⁰ (volle Dreiecke), Ne⁰ (offene Kreise) und Ar⁰ (volle Quadrate) an Cu(111) unter $\Phi_{in} = 4,6^\circ$ als Funktion der Projektilgeschwindigkeit

und Argonatomen an der Al(111)-Oberfläche soll diese Betrachtung für Streuung an einer Cu(111)-Oberfläche fortgesetzt werden. Dazu sind in Abbildung 6.34 die Quadratwurzeln der experimentell bestimmten Elektronenausbeuten bei der Streuung von He⁰ (volle Dreiecke), Ne⁰ (offene Kreise) und Ar⁰ (volle Quadrate) an Cu(111) unter $\Phi_{in} = 4,6^\circ$ als Funktion der Projektilgeschwindigkeit dargestellt. Da im Gegensatz zu Al(111) an Cu(111) keine Elektronenpromotion beobachtet wurde, ist der Einfallswinkel für die Kupferoberfläche größer, um Bereiche mit höherer Elektronendichte zu untersuchen. Die gestrichelte Linie in der Abbildung repräsentiert die theoretische Schwellengeschwindigkeit $v_{th} = 0,101$ a.u. für die Elektronendichte im Volumen des Festkörpers. Analog zur Aluminiumoberfläche werden durch Argonatome bei gleicher Geschwindigkeit mehr Elektronen emittiert als durch Neon- und Heliumatome, wobei die Elektronenausbeute für He⁰ am geringsten ist. Dies kann wieder als direkte Folge der experimentellen Bedingungen gewertet werden. Durch die geringere Senkrechterenergie und damit größeren Abstand zur Oberfläche wechselwirken die He⁰-Atome mit Elektronen deren Energie geringer ist als für Ne⁰ und Ar⁰. Unterhalb der klassischen Schwelle ist analog zu Al(111) bei der Streuung von He⁰ keine Elektronenemission zu beobachten, wohingegen für Ne⁰ und Ar⁰ Elektronen auch unter v_{th} nachgewiesen werden. Dieses Verhalten kann mit den gleichen Argumenten wie für die Al(111)-Oberfläche begründet werden. Ein Einfluß der projizierten Bandlücke der Cu(111)-Oberfläche ist auch unterhalb der klassischen Schwelle nicht nachweisbar.

Kapitel 7

Azimutale Abhängigkeiten von Elektronenemission und Energieverlust

Wurde in den vorherigen Kapiteln der azimutale Winkel zwischen Projektilstrahl und Target so gewählt, dass keine niedrig indizierten Kristallrichtungen getroffen werden, soll nun die Abhängigkeit der Elektronenemission und des Energieverlustes vom Azimutwinkel näher untersucht werden.

Die kristallographische Orientierung eines Kristalls relativ zum auftreffenden Projektil beeinflusst die Wechselwirkung und damit die Trajektorie des Projektils. Dies gilt besonders für die Streuung entlang niedrig indizierter Kristallrichtungen (axiales Channeling). Dieser Effekt wurde in Computersimulationen [98] entdeckt und in Experimenten zur Reichweite von Ionen in dünnen Folien bestätigt [99]. Der Einfluß des Channelings auf Trajektorien, Energieverlust und Elektronenemission wurde in den letzten Jahrzehnten untersucht [100]. Ein besonderer Fall des Channelings wird bei der streifenden Streuung erreicht. Wird ein Projektil streifend entlang einer niedrig indizierten Kristallrichtung gestreut, kommt es zu einer zusätzlichen Führung des Projektils durch die Atomketten der ersten Lagen (axiales Oberflächen-Channeling).

Ein prominenter Effekt bei der Ionenstreuung ist der Anstieg der Elektronenausbeute, wenn der azimutale Einfallswinkel der Projektile mit einer niedrig indizierten Kristallrichtung übereinstimmt [101, 102, 103]. Die erhöhte Elektronenausbeute beim Übergang vom planaren zum axialen Oberflächen-Channeling wurde bisher folgendermaßen erklärt. Für das axiale Channeling kommen die Projektile in Bereiche höherer Elektronendichte und durchlaufen längere Trajektorien [104]. Im Folgenden wird aufgezeigt, dass der Effekt der unterschiedlichen Trajektorien speziell für langsame Projektile mit Geschwindigkeiten unterhalb von $v = 0,5$ a.u. die Differenzen in den Elektronenausbeuten für die beiden Regimes nicht erklärt.

In Abbildung 7.1 ist der Targetstrom bei azimutaler Drehung um die Oberflächennormale der Al(111)-Oberfläche für die Streuung von 16 keV He^+ -Ionen unter

einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 1,9^\circ$ dargestellt. Die prominenten Peaks werden den $\langle 110 \rangle$ -Richtungen zugeschrieben und zeigen die sechszählige Symmetrie der Al(111)-Oberfläche. Neben den Hauptrichtungen sind um $\Theta = 30^\circ$ versetzt schwä-

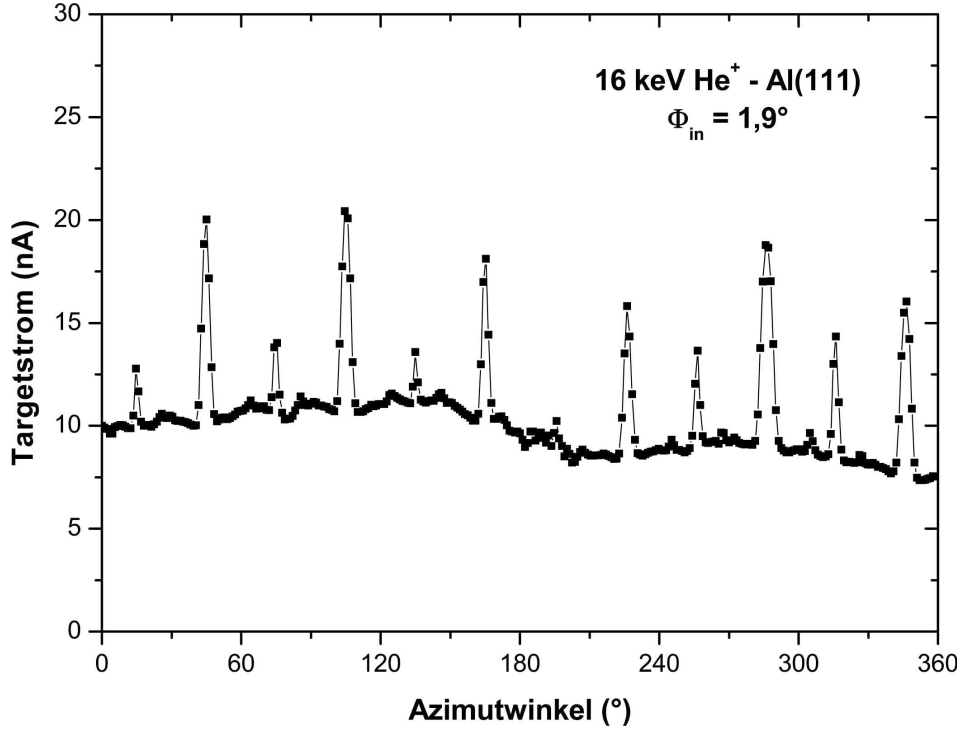


Abbildung 7.1: Targetstromkurve bei der Streuung von 16 keV He^+ -Ionen an Al(111) unter $\Phi_{in} = 1,9^\circ$

chere Peaks für die Streuung entlang der $\langle 211 \rangle$ -Richtungen erkennbar. Die Breite der Peaks wird durch den Übergangswinkel vom planaren zum axialen Channeling Θ_{ap} bestimmt [101].

$$\Theta_{ap}^2 = \frac{\pi}{2} \frac{d_{ap}}{a \cdot d_{hkl}} \frac{Z_1 Z_2}{E_0} \Phi \left(\frac{z_{min}}{a} \right) \quad (7.1)$$

Dabei sind $\Phi(x)$ die Abschirmfunktion des Potentials und z_{min} der minimale Abstand zur Oberfläche bei Random-Streuung (Streuung entlang hoch indizierter Kristallrichtungen). Θ_{ap} hängt für eine feste Projektilenergie E_0 vom Abstand d_{ap} zwischen benachbarten $[hkl]$ -Atomreihen und der Entfernung d_{hkl} der Atome innerhalb der $[hkl]$ -Atomreihe ab [100, 101]. Mit steigendem Index verringert sich d_{ap} wohingegen d_{hkl} ansteigt. Dadurch nimmt die Breite der Peaks im Targetstrom ab.

Zur Untersuchung der Ursachen für das Ansteigen der Elektronenausbeute in Kanalrichtung wurden Streuexperimente mit He^0 durchgeführt. Zusätzlich zu den bisher diskutierten koinzidenten Elektronenspektren zeigt sich bei dieser Untersuchung die Wichtigkeit der nicht koinzidenten Spektren. In Abbildung 7.2 sind die koinzidenten Elektronenzahlspektren für den Fall von planarem und axialem Oberflächen-Channeling bei der Streuung von 16 keV He^0 an Al(111) unter einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 1,9^\circ$ dargestellt. Zum besseren Vergleich wurden

die Spektren auf gleiche Flächen normiert. Nach der Erklärung durch Andou [104] sollte das Spektrum für axiales Channeling deutlich gegen das für planares Oberflächen-Channeling (Random-Streuung) verschoben sein. Dieses Resultat kann mit den Messungen dieser Arbeit nicht bestätigt werden. Die Spektren für die unterschiedlichen azimuthalen Regimes zeigen keine Verschiebung zu höheren Elektronenzahlen. Die Elektronenausbeute für die Random-Richtung beträgt $\gamma = 3,1$

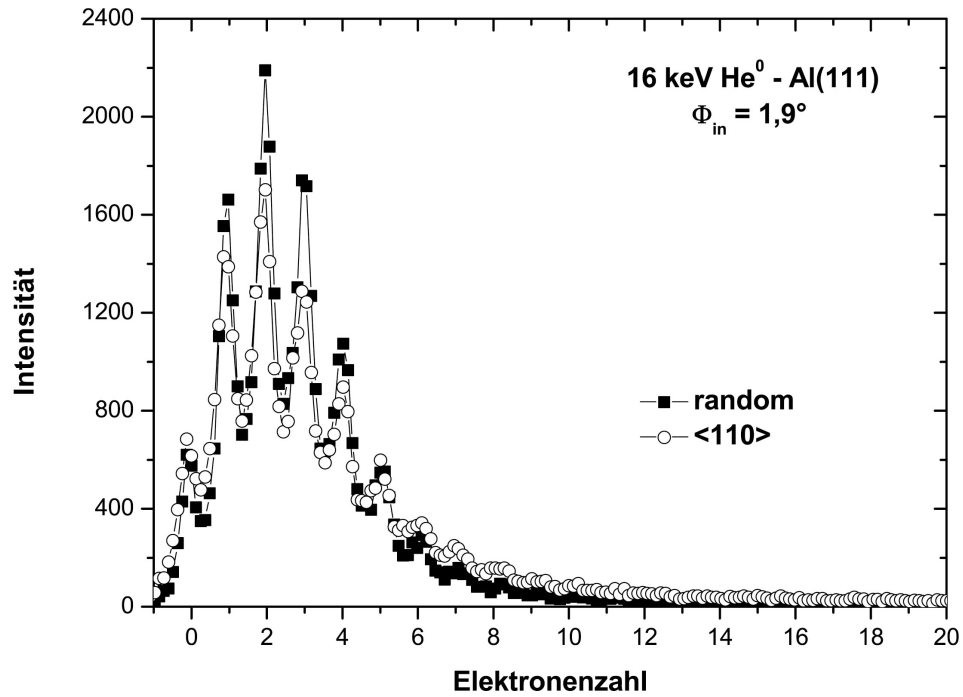


Abbildung 7.2: Koinzidente Elektronenzahlspektren bei der Streuung von 16 keV He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 1,9^\circ$; volle Quadrate: Random-Streuung, offene Kreise: $\langle 110 \rangle$ -Richtung

und die für die $\langle 110 \rangle$ -Richtung $\gamma = 3,2$. Der minimale Unterschied in den Ausbeuten für beide Richtungen ist nicht als Ursache für den deutlichen Anstieg des Targetstroms in Abbildung 7.1 (ca. Faktor 2) zu sehen. Für die Anzahl der emittierten Elektronen spielen die Länge der Trajektorien und der Punkt der dichtesten Annäherung und damit die Elektronendichte die entscheidende Rolle. Die Länge der Trajektorien ist für beide Azimutwinkel aufgrund des gleichen planaren Einfallswinkels als gleich anzusetzen. Entlang der niedrig indizierten Kristallrichtungen kommen die Projektile näher an die Oberfläche heran als bei planarem Oberflächen-Channeling und wechselwirken daher mit Elektronen höherer Energie. Aus diesen Überlegungen sollte die Elektronenausbeute im Kanal höher als die in einer Random-Richtung sein. Zur genaueren Betrachtung dieses Phänomens sind in Abbildung 7.3 die Energieverlustspektren für die jeweiligen koinzidenten Elektronenzahlspektren dargestellt. Der Energieverlust für die Random-Richtung (Quadrate in Abb. 7.3) zeigt den typischen gaußförmigen Verlauf und der mittlere Energieverlust beträgt $\Delta E = 524$ eV. Das Spektrum für den Kanal (offene Kreise in Abb. 7.3) zeigt einen dominanten Peak bei $\Delta E = 359$ eV und einen

zusätzlichen bei $\Delta E = 601$ eV. Die Mehrzahl der Projektile, die entlang der $\langle 110 \rangle$ -Richtung gestreut und vom Channelplate erfaßt werden, verliert demnach weniger Energie als für den Fall des planaren Oberflächen-Channelings. Der Energieverlust für den zweiten Peak ist höher als für die Random-Richtung. Die Ursache für dieses Resultat liegt im Potentialverlauf entlang der $\langle 110 \rangle$ -Atomreihen begründet.

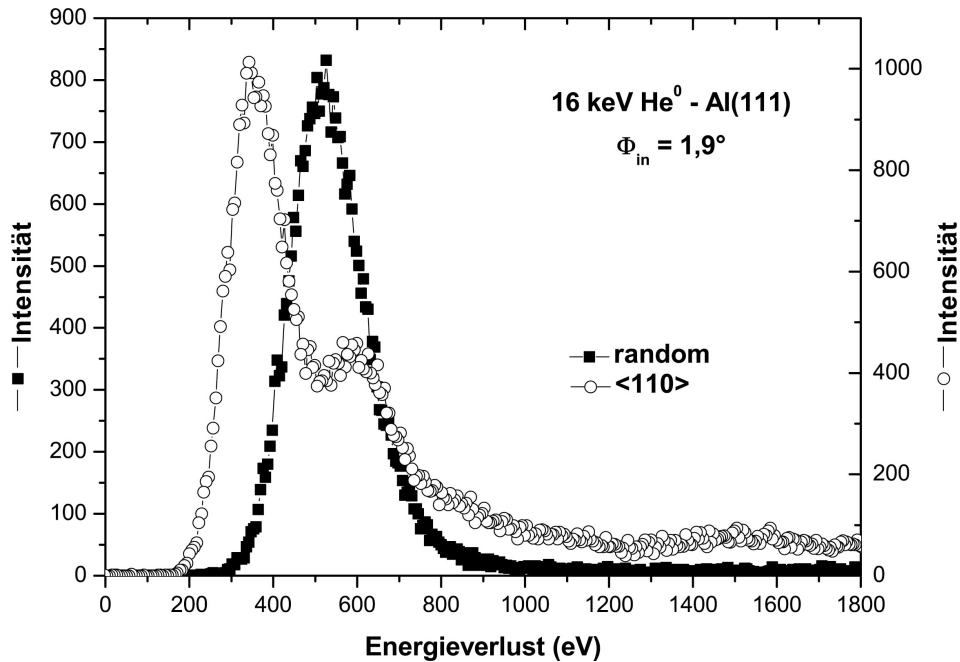


Abbildung 7.3: Energieverlustspektren bei der Streuung von 16 keV He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 1,9^\circ$; volle Quadrate: Random-Streuung, offene Kreise: $\langle 110 \rangle$ -Richtung

Entlang der niedrig indizierten Atomreihen ist das Potential aufgrund des geringeren Abstandes der Atome stärker als das planare Oberflächenpotential. Dadurch kommen Projektile, die an den Ketten der obersten Lage gestreut werden, nicht so dicht an die Oberfläche heran, wie im Fall der Random-Streuung. Aus dem größeren Abstand folgt unmittelbar eine geringere Elektronendichte und damit ein geringerer Energieverlust. Für die Projektile, die zwischen den Ketten der obersten Atomlage gestreut werden, gelten die Argumente, wie sie in [104] gegeben werden. Durch die Korrugation des Potentials dringen die Atome zu höheren Elektronendichten vor, und es kann zu Mehrfachstreuungen an benachbarten Atomreihen kommen, wodurch der Energieverlust steigt. Die enge Verknüpfung von Energieverlust und Elektronenemission bei Metallen führt zu dem Schluß, dass Projektile mit geringerem Energieverlust zu einer geringeren Elektronenemission führen und umgekehrt. Die Effekte der unterschiedlichen Punkte der Streuung heben sich damit auf und im Mittel verändert sich die koinzidente Elektronenausbeute kaum.

In Abbildung 7.4 sind die, zu den Daten in Abbildung 7.2 gehörenden, nicht koinzidenten Elektronenzahlspektren dargestellt. Die Spektren lassen sich in zwei unterschiedliche Abschnitte aufteilen. Für Elektronenzahlen $n \leq 4$ zeigt sich eine

generelle Reduzierung der Intensität um ca. 20 % für die $\langle 110 \rangle$ -Richtung. Das bedeutet, dass sich für 80 % der Projektile die Elektronenausbeute im Kanal nicht ändert. Die Projektile, die im Bereich kleiner Elektronenzahlen fehlen, führen zu einem deutlichen Anstieg der Intensitäten bei hohen Elektronenzahlen. Obwohl der Großteil der Projektile an der Oberfläche gestreut wird und keine merklichen Änderungen in der Elektronenausbeute produziert, führt der Teil der in den Festkörper eindringenden Projektile zu einer deutlichen Erhöhung der Ausbeute und damit des Targetstromes. So beträgt die Elektronenausbeute für die Random-Richtung $\gamma = 6,14$ und für die $\langle 110 \rangle$ -Richtung $\gamma = 9,25$. Das Eindringen der Projektile auch unterhalb des kritischen Winkels für axiales Channeling kann auf thermische Schwingungen der Targetatome und auf Störungen der Kristalloberfläche zurückgeführt werden.

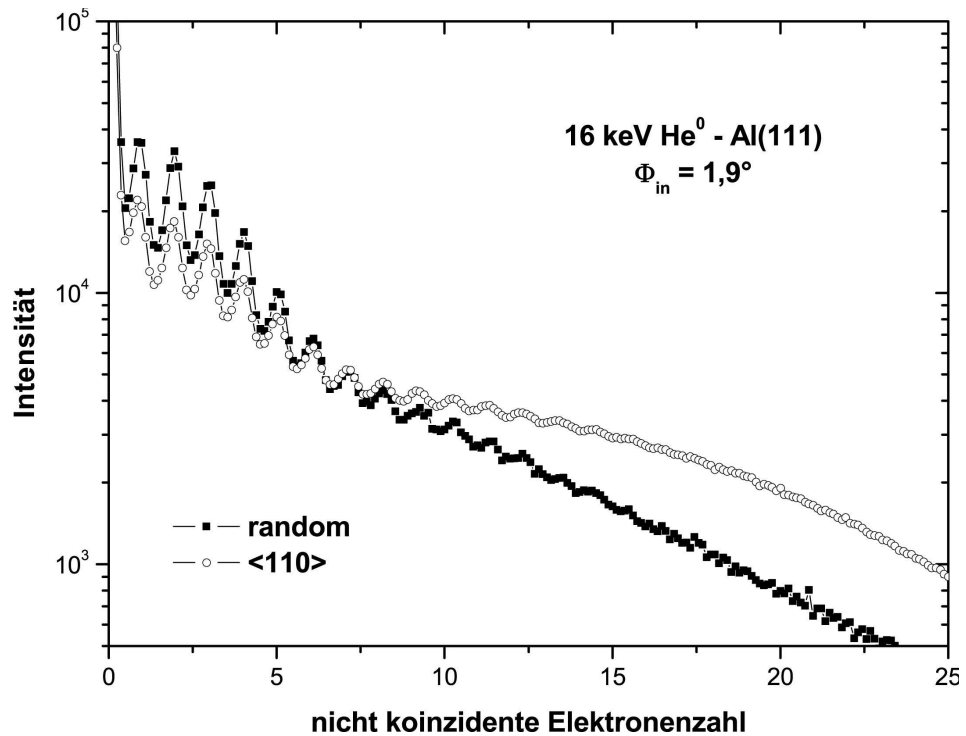


Abbildung 7.4: Nicht koinzidente Elektronenzahlspektren bei der Streuung von 16 keV He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 1,9^\circ$; volle Quadrate: Random-Streuung, offene Kreise: $\langle 110 \rangle$ -Richtung

Zur Demonstration der unterschiedlichen Einflüsse der koinzidenten und nicht koinzidenten Elektronenausbeuten auf den Targetstrom entlang niedrig indizierter Kristallrichtungen dient Abbildung 7.5. Dort sind die Ausbeuten für verschiedene Azimutwinkel Θ als Bargraphen zusammen mit dem Targetstrom dargestellt. Die vollen Balken repräsentieren die koinzidenten und die offenen Balken die Summe aus koinzidenten und nicht koinzidenten Elektronenausbeuten. Deutlich ist an dieser Abbildung der minimale Einfluß der koinzidenten Elektronenausbeute auf den Anstieg des Targetstroms entlang niedrig indizierter Kristallrichtungen zu erkennen. Der Targetstrom in Abbildung 7.5 setzt sich im Wesentlichen aus den einfal-

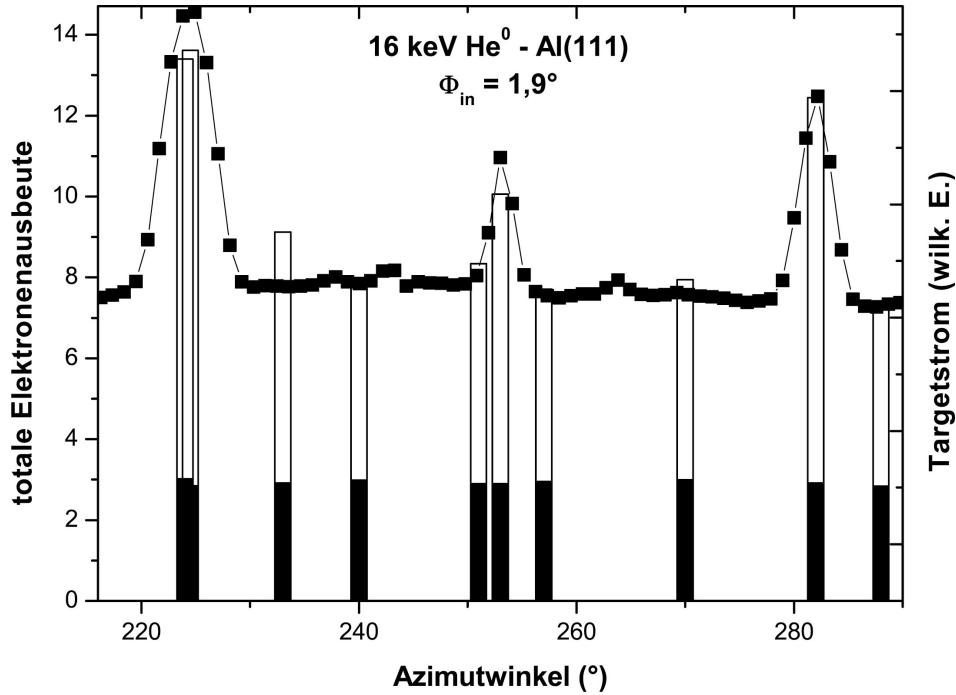


Abbildung 7.5: Koinzidente (volle Blöcke) und Summe aus koinzidenten und nicht koinzidenten (offene Balken) Elektronenausbeuten zusammen mit Targetstrom (Quadrate) als Funktion des azimutalen Einfallswinkels bei der Streuung von 16 keV He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 1,9^\circ$

lenden Ionen und den emittierten Elektronen zusammen. Somit wird dieser Strom neben dem konstanten Anteil an Projektilionen hauptsächlich durch die Elektronenausbeute bestimmt, sodass in der Abbildung die Skalierung des Targetstroms gerechtfertigt werden kann.

In Abbildung 7.6 (a) ist die Differenz der nicht koinzident gemessenen Elektronenausbeuten entlang der $\langle 110 \rangle$ -Richtung und planarem Oberflächen-Channeling für drei verschiedene polare Einfallswinkel als Funktion der Projektilenergie dargestellt. Bei kleinen Projektilenergien existieren für die Elektronenausbeute keine Unterschiede zwischen planarem und axialem Channeling. Ab $E = 6$ keV werden entlang der $\langle 110 \rangle$ -Richtung mehr Elektronen emittiert. Bei der Streuung unter $\Phi_{in} = 4,4^\circ$ ist eine Sättigung der dargestellten Differenz zu erkennen. Dies kann auf die hohen Senkrechtereignisse in diesem Bereich zurückgeführt werden. Nähert sich die Senkrechtereignisse der kritischen Energie für planares Oberflächen-Channeling, steigt die Wahrscheinlichkeit aufgrund vorhandener Oberflächenstörungen für das Eindringen der Projektile in den Festkörper, sodass die Unterschiede zum axialen Channeling reduziert werden.

Ein ähnliches Resultat liefern die Untersuchungen der Cu(111)-Oberfläche. In Abbildung 7.6 (b) sind analog zur Streuung an Al(111) die Differenzen der Elektronenausbeuten, die in $\langle 110 \rangle$ - und in Random-Richtung erzielt wurden, für das System He^0 -Cu(111) als Funktion der Projektilenergie für drei polare Einfallswinkel darge-

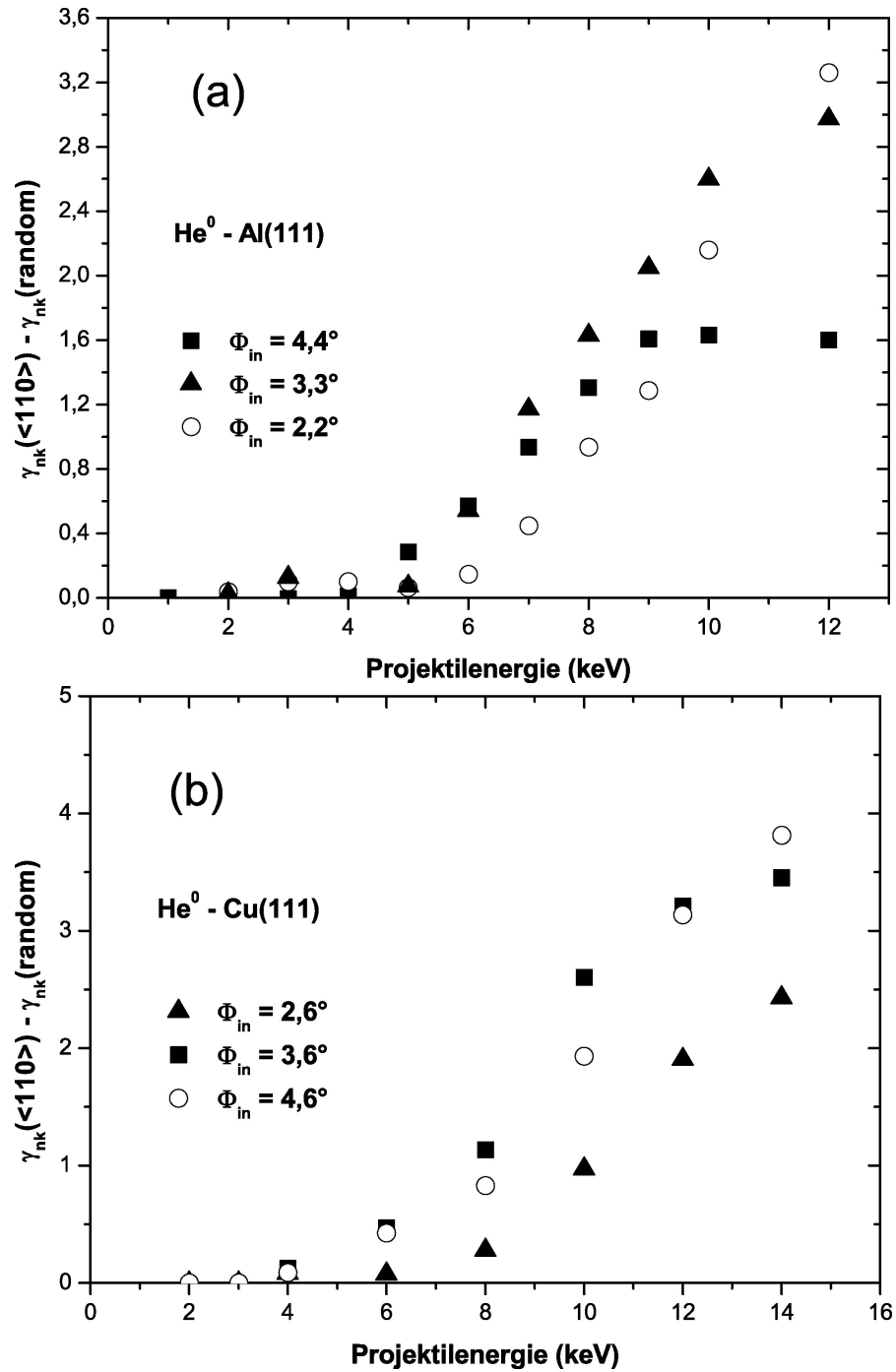


Abbildung 7.6: Differenz der nicht koinzidenten Elektronenausbeuten für die $\langle 110 \rangle$ -Richtung und planares Oberflächen-Channeling bei der Streuung von He⁰ an: (a) Al(111) unter $\Phi_{in} = 2,2^\circ$, $\Phi_{in} = 3,3^\circ$ und $\Phi_{in} = 4,4^\circ$; (b) Cu(111) unter $\Phi_{in} = 2,6^\circ$, $\Phi_{in} = 3,6^\circ$ und $\Phi_{in} = 4,6^\circ$

stellt. Wie bei Al(111) setzen für die verschiedenen Winkel meßbare Unterschiede bei gleicher Projektilenergie und damit unabhängig von der Senkrechtere Energie E_\perp

ein. Eine Sättigung bei großem Einfallswinkel ist aufgrund der höheren kritischen Energie dieses Systems nicht zu beobachten. Bei der Anwendung der Elektronenemission zur Strukturanalyse (Ionenstrahl-Triangulation [105]) können damit die kristallographischen Kanäle bei ausreichend hoher Streuenergie unter beliebigen Einfallswinkeln durchgeführt werden.

Der Übergang vom planaren zum axialen Oberflächen-Channeling ist nicht nur anhand veränderter Elektronenausbeuten zu erkennen. Vielmehr ändern sich aufgrund der Potentialkorrugation entlang der kristallographischen Richtungen auch die Energieverluste der gestreuten Projektile. Die Bestimmung von Oberflächenstrukturen mit Hilfe streifender Streuung birgt die Gefahr von Strahlenschäden und damit Veränderungen der zu untersuchenden Struktur. Dem kann durch die Verwendung von leichten Projektilen und damit kleinen Sputterkoeffizienten sowie geringen Strahlintensitäten entgegengewirkt werden. Eine weitere Reduktion von Strahlenschäden wird durch die Verringerung der Projektilenergie erreicht. Beim Nachweis der emittierten Elektronen wird bei Verminderung der Energie ein Punkt erreicht, ab dem sich die Elektronenausbeuten nicht mehr unterscheiden. In Abbildung 7.7 wird dies für die Streuung von 2 keV He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 4,4^\circ$ demonstriert. Die nicht koinzidenten Elektronenzahlspektren für planares Oberflächen-Channeling (blaue Kurve) und für die Streuung entlang der $\langle 110 \rangle$ -Richtung (rote Kurve) wurden zum besseren Vergleich auf gleiche Flächen (Teilchenzahlerhaltung) normiert. Anhand der Elektronenemission kann in diesem Fall nicht mehr zwischen den beiden Channelingregimes unterschieden werden, da

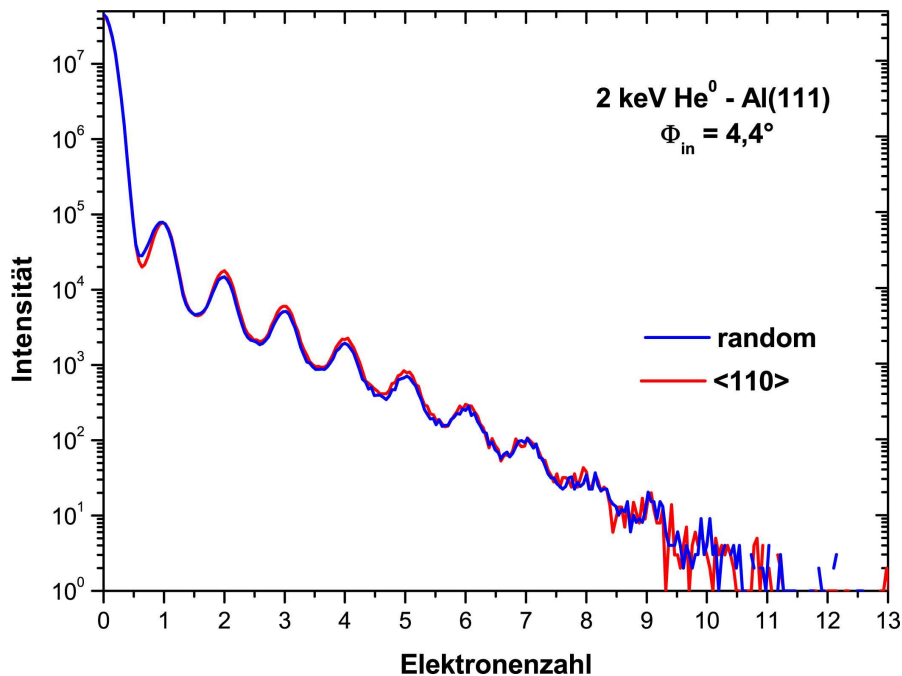


Abbildung 7.7: Nicht koinzidente Elektronenzahlspektren bei der Streuung von 2 keV He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 4,4^\circ$; blau: Random-Richtung, rot: $\langle 110 \rangle$ -Richtung

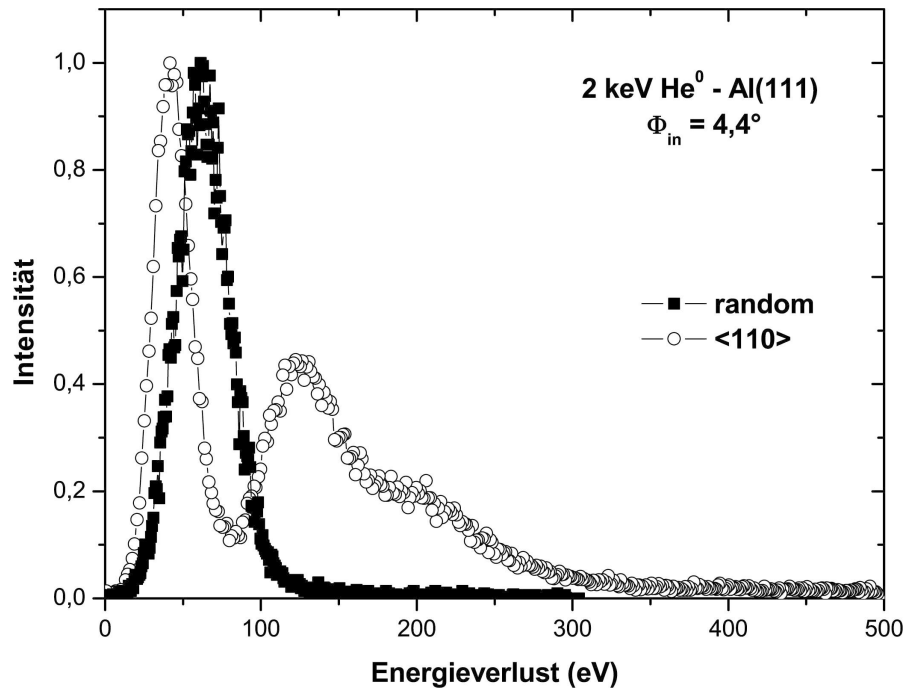


Abbildung 7.8: Energieverlustspektren bei der Streuung von 2 keV He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 4,4^\circ$; Quadrate: Random-Richtung, Kreise: $\langle 110 \rangle$ -Richtung

die beiden Spektren keinerlei Unterschiede aufweisen. Ein anderes Resultat liefert die Betrachtung der zu den jeweiligen Streubedingungen gehörenden Energieverlustspektren (Abb. 7.8). Hier sind deutliche Unterschiede zwischen der Random-Richtung und dem $\langle 110 \rangle$ -Kanal erkennbar (Normierung auf gleiche Höhen der dominanten Peaks). Der mittlere Energieverlust für planares Oberflächen-Channelling beträgt $\Delta E_{rand} = 62,4$ eV. Für das axiale Oberflächen-Channelling entlang der $\langle 110 \rangle$ -Richtung ergeben sich drei Peaks mit Energieverlusten von $\Delta E_{\langle 110 \rangle,1} = 42,8$ eV, $\Delta E_{\langle 110 \rangle,2} = 125,7$ eV und $\Delta E_{\langle 110 \rangle,3} = 203,7$ eV. Diese Aufspaltung ist analog zur Streuung von 16 keV He^0 auf die von Andou et al. [104] prognostizierten Trajektorieneffekte zurückzuführen.

Die Betrachtungen bei 2 keV Projektilenergie widerlegen die Erklärungen früherer Arbeiten zum Auftreten von Peaks im Targetstrom entlang niedrig indizierter Kristallrichtungen. Die höheren Elektronendichten und längeren Trajektorien entlang der $\langle 110 \rangle$ -Richtung beeinflussen zwar den Energieverlust gestreuter Projektile, resultieren aber nicht in einer Veränderung von Elektronenzahlspektren und damit der Elektronenausbeuten.

In Abbildung 7.9 sind die Elektronenzahlspektren für die Streuung von 18 keV Ne^0 an Al(111) bei einem polaren Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 3,3^\circ$ dargestellt. Die blaue Kurve entspricht dem planaren Oberflächen-Channelling, die rote dem axialen. Zum Vergleich wurden analog zu Abbildung 7.7 die Spektren auf gleiche Flächen normiert. Im axialen Kanal reduziert sich die Anzahl bei kleinen Elektronenzahlen,

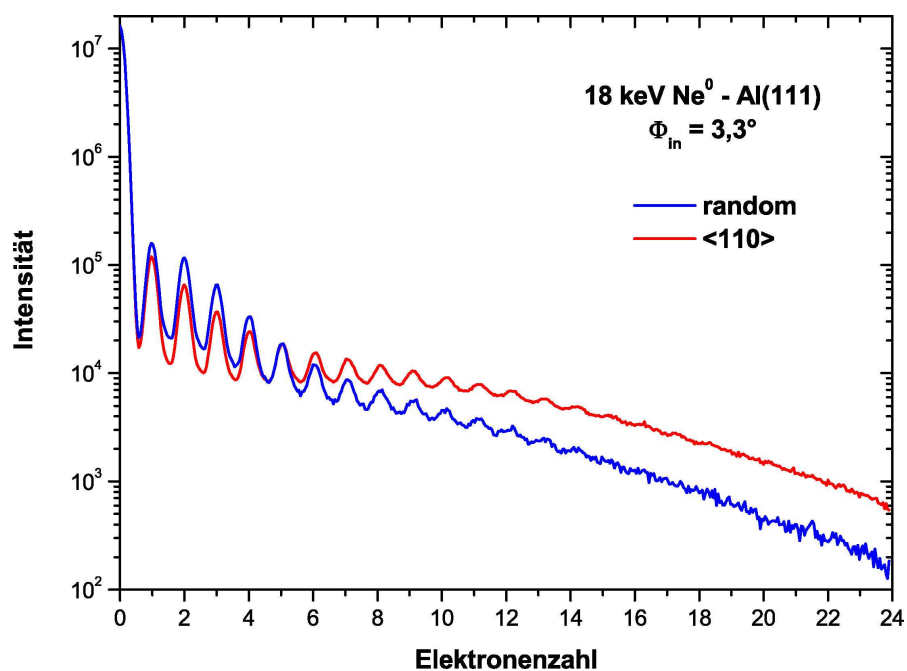


Abbildung 7.9: Nicht koinzidente Elektronenzahlspektren bei der Streuung von 18 keV Ne^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 3,3^\circ$; blau: Random-Richtung, rot: $\langle 110 \rangle$ -Richtung

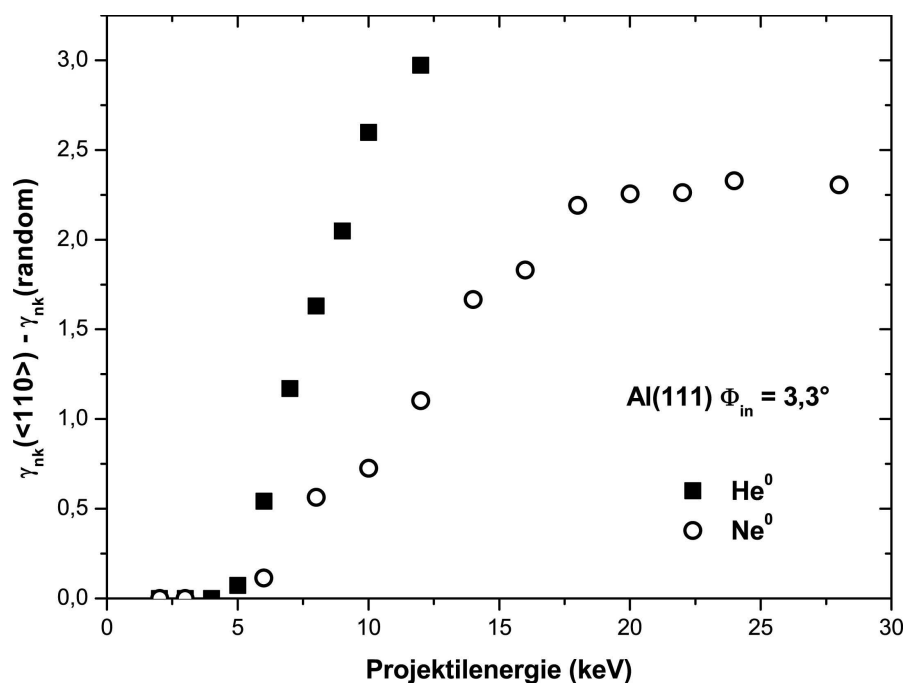


Abbildung 7.10: Differenz der nicht koinzidenten Elektronenausbeuten für die $\langle 110 \rangle$ -Richtung und planares Oberflächen-Channeling bei der Streuung von Ne^0 (offene Kreise) und He^0 (volle Quadrate) an Al(111) unter $\Phi_{in} = 3,3^\circ$

wobei gleichzeitig die Zahl der Projektile, die eine Vielzahl von Elektronen mehr auslösen ansteigt. Die gleiche Argumentation wie bei der Streuung von Helium führt auch hier zu dem Schluß, dass für den Anstieg der Elektronenausbeuten in den Festkörper gestreute Projektile verantwortlich sind. Die Ursache für das Auftreten von Unterschieden in der Elektronenemission beim Übergang vom planaren zum axialen Oberflächen-Channeling ist demnach unabhängig von der Ionen- bzw. Atomsorte. Neben diesem Resultat ergeben sich beim Vergleich der Streuung von Helium- und Neonatomen weitere Gemeinsamkeiten. In Abbildung 7.10 sind die Unterschiede zwischen den nicht koinzidenten Elektronenausbeuten für Random- und $\langle 110 \rangle$ -Sreuung als Funktion der Projektilenergie unter einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 3,3^\circ$ aufgetragen. Für beide Atome sind Unterschiede in den Elektronenausbeuten erst ab $E_0 = 6$ keV erkennbar. Die in den Festkörper eindringenden Projektile können ihre gesamte kinetische Energie auf Elektronen übertragen. Der Energieübertrag auf ein einzelnes Elektron hängt, wie in den vorherigen Kapiteln erläutert, von der Projektilgeschwindigkeit ab. Aufgrund der bei gleicher Energie um den Faktor $\sqrt{5}$ höheren Geschwindigkeit der Heliumatome können diese auch einen höheren Impuls auf einzelne Elektronen übertragen, sodass für die direkten Elektronenanregungen eine größere Emissionswahrscheinlichkeit vorliegt. Des Weiteren können hochenergetische Elektronen auf ihrem Weg aus den Festkörper heraus andere Elektronen anregen, die dann ebenfalls emittiert werden (Elektronen-Kaskaden). Die Elektron-Elektron-Wechselwirkungen tragen demnach mehr bei der Streuung von Helium zur Elektronenemission bei. Das Zusammenspiel von direkten Anregungen und Elektronen-Kaskaden führt zu dem in Abbildung 7.10 erkennbaren stärkeren Anstieg für die Streuung von He^0 .

Nach den vorangegangenen Diskussionen zum Verständnis der Daten soll kurz auf die Anwendung zur Analyse kristallographischer Strukturen eingegangen werden. Wie am Beispiel der Streuung von 2 keV He^0 an Al(111) gezeigt wurde, ist der Energieverlust die sensitivere Observable. Um besonders empfindliche Oberflächenstrukturen (geringe Bindungsenergien) zu untersuchen, bietet sich eine Analyse der Energieverlustverteilungen an. Der Nachteil dieser Methode sind die relativ langen Meßzeiten mit dem in dieser Arbeit verwendeten experimentellen Aufbau. So betrug die Meßzeit für die Spektren in Abbildung 7.8 annähernd 20 Minuten. Bei großen azimuthalen Winkelbereichen steigt die Zeit der Untersuchung deutlich an.

Die Verwendung der Elektronenemission zur Identifikation niedrig indizierter Kristallrichtungen bedarf höherer Projektilenergien (siehe Abb. 7.6). Da bei dieser Messung keine Koinzidenz notwendig ist und somit keine Pulsung der Projektile erfolgen muß, können Atomstrahlen mit höherer Zählrate verwendet werden. Dadurch kommt es zu einer deutlichen Reduzierung der Meßzeit. Eine Erhöhung der Signalstärke beim Übergang von planarem zu axialem Oberflächen-Channeling kann durch die Betrachtung von Abschnitten innerhalb der Spektren erreicht werden. In Abbildung 7.11 (a) - (c) ist das Signal des Elektronendetektors durch einen Diskriminator begrenzt für die Streuung von 16 keV He^0 an Al(111) unter einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 1,9^\circ$ als Funktion des Azimutwinkels Θ dargestellt. Die Grafiken (a1) - (c1) demonstrieren die Abschnitte des nicht koinzidenten

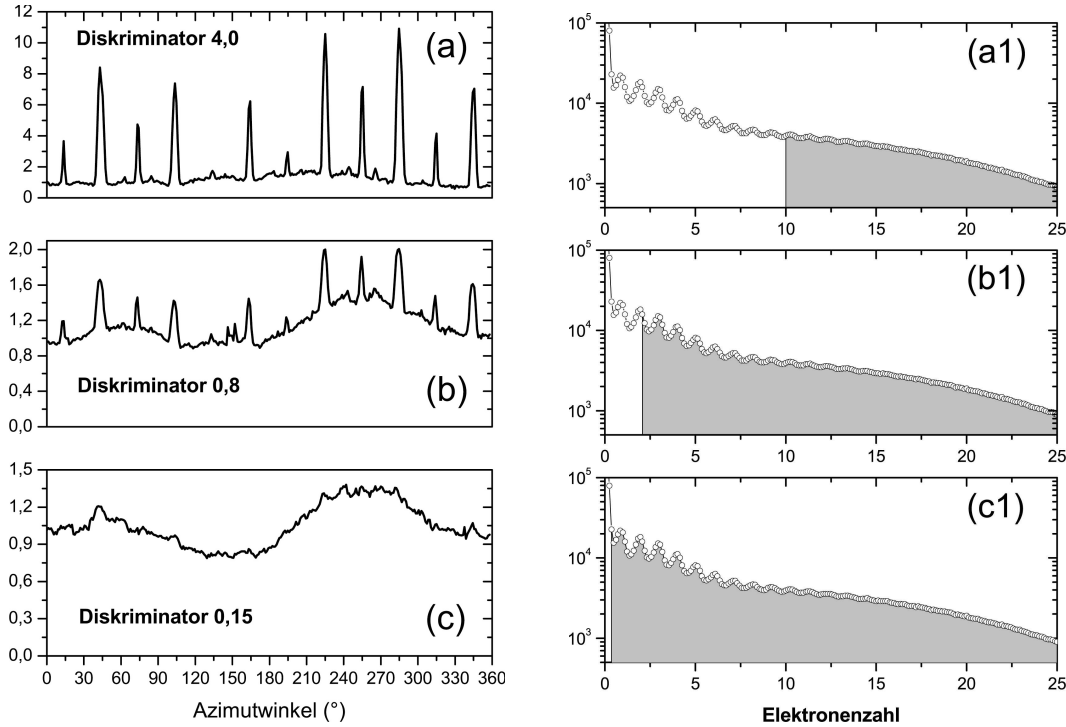


Abbildung 7.11: Normierte Zählraten des Elektronendetektors bei der Streuung von 16 keV He⁰ an Al(111) unter $\Phi_{in} = 1,9^\circ$ bei Diskriminatorschwellen von (a) 4,0 ; (b) 0,8 und (c) 0,15; die Abbildungen (a1), (b1) und (c1) zeigen Anhand des nicht koinzidenten Elektronenzahlspektrums für die $\langle 110 \rangle$ -Richtung die durch den jeweiligen Diskriminator erfassten Elektronenzahlen (grauer Bereich)

Elektronenzahlspektrums für die Streuung entlang der $\langle 110 \rangle$ -Richtung, die bei der jeweiligen Diskriminatoreinstellung erfasst werden (ausgefüllte Flächen). Im Gegensatz zur Auswertung der Elektronenzahlspektren, erhält man vom Diskriminator keine Informationen über die Elektronenausbeute. Vielmehr gibt diese Messung immer dann ein Signal, wenn das Ausgangssignal des Elektronendetektors (Höhe der Spannung) innerhalb der Diskriminatorschwellen liegt. So kann man bei einer Schwelle, die das gesamte Ausgangssignal des Detektors überdeckt, keine Unterschiede zwischen planarem und axialem Oberflächen-Channeling erkennen (Abb. 7.6 (c)), da in jedem Fall mindestens ein Elektron nachgewiesen wird. Erhöht man die untere Schwelle und vernachlässigt damit Ereignisse mit geringer Elektronenzahl, werden die aus dem Targetstrom bekannten Peaks sichtbar (Abb. 7.6 (b)). Der Vorteil dieser Methode wird in Abbildung 7.6 (a) deutlich. Bei weiterer Erhöhung kann somit beispielsweise ein Peakverhältnis zwischen Random- und $\langle 110 \rangle$ -Streuung von 1 zu 10 erzielt werden. Anwendung findet diese Methode in der Ionenstrahl-Triangulation zur Bestimmung der Struktur von Oberflächen und ultradünnen Filmen [106].

Kapitel 8

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurden die kinetische Elektronenemission und der Energieverlust koinzident bei der streifenden Streuung von Helium-, Neon- und Argonatomen im Grundzustand an Al(110)-, Al(111)- und Cu(111)-Oberflächen studiert. Der untersuchte Energiebereich erstreckt sich von $E_0 = 200$ eV bis $E_0 = 30$ keV bei Einfallswinkeln zwischen $\Phi_{in} = 1,3^\circ$ und $\Phi_{in} = 5,5^\circ$.

Für die Heliumatome wurde im untersuchten Energie-/Geschwindigkeitsbereich eine lineare Abhängigkeit der „stopping power“ von der Projektilgeschwindigkeit, basierend auf der binären Wechselwirkung zwischen dem Projektil und den Valenzelektronen der Oberfläche, bestätigt. Aufgrund der bei Metallen engen Verknüpfung zwischen Energieverlust und Elektronenemission überträgt sich diese Abhängigkeit auf die Elektronen-Produktionsrate, die für die Elektronenemission das Analogon zur „stopping power“ beim Energieverlust darstellt.

Bei der Streuung von Neonatomen an der Al(111)-Oberfläche wurde anhand der koinzidenten Detektion von Energieverlust und Elektronenzahl ein Übergang von der Wechselwirkung Projektil-Valenzelektron bei Senkrechterenergien $E_\perp < 25$ eV zu elektronischen Anregungen der Projektile in harten Stößen mit Atomen der Oberflächen bei $E_\perp > 25$ eV beobachtet. Diese Anregung wird auf die Promotion eines oder zweier Elektronen des $2p^6Ne$ -Grundzustandes zurückgeführt. Durch die koinzidente Messung konnten erstmals die Anteile, die zur Emission von einem oder mehreren Elektronen führen, mit denen, die nur die Anregung des Neonatoms bewirken, verglichen werden.

Besonderes Augenmerk lag in dieser Arbeit auf dem Schwellenverhalten der kinetischen Elektronenemission. Dieses kann insbesondere bei der Streuung von Heliumatomen mit einem binären Stoßmodell zwischen dem Projektil und einem Valenzelektron der Oberfläche erklärt werden. Aufbauend auf Phasenraum-Betrachtungen im Impuls-Raum werden durch das vorgestellte Modell eine quadratische Abhängigkeit der Elektronenausbeute von der Projektilgeschwindigkeit, Anteile der Elektronenemission am gesamten Energieverlust sowie der Energieübertrag auf emittierte Elektronen vorausgesagt. Diese theoretischen Vorhersagen werden experimentell bestätigt. Abweichungen der experimentellen von den theoretischen Schwellengeschwindigkeiten können auf die Eigenschaften des Streuprozesses

zurückgeführt werden. Bei der streifenden Streuung dringen die Projektile nicht in Bereiche vor, in denen die Elektronendichte den Wert innerhalb des Festkörpers hat. Durch die reduzierte Elektronendichte folgen unmittelbar geringere Elektronenenergien und -impulse. Damit Elektronen mit Impulsen $k < k_F$ emittiert werden können, muß für einen ausreichenden Impulsübertrag die Projektilenergie ansteigen. Aufbauend auf diesem Befund wurden durch Variation des Einfallswinkels Schwellengeschwindigkeiten in verschiedenen Abständen zur Oberfläche bestimmt. Mit Hilfe dieser Methode können die effektiven Elektronenimpulse und daraus die Potentiale der Elektronen vor der Oberfläche bestimmt werden.

Für die Streuung von Neon- und Argonatomen wurden unterhalb der klassischen Schwelle für kinetische Elektronenemission definierte Elektronenausbeuten nachgewiesen. Diese Elektronenemission wird durch das Zusammenspiel zweier Mechanismen erklärt. Durch die Potentialstufe vor der Oberfläche, Korrugation der Elektronendichte und Korrelation der Elektronen existieren in der Impulsverteilung vor der Oberfläche Komponenten mit Impulsen $k > k_F$. Durch die theoretische Betrachtung der Rückstreuung von Elektronen an den neutralen Projektilen mit Hilfe der „on-(the energy)-shell“-Näherung der Impulsverteilung kann die Geschwindigkeitsabhängigkeit der Elektronenausbeuten in diesem Regime erklärt werden. Durch die Betrachtung der Verschiebung zwischen den Energieverlustspektren für Streuereignisse verbunden mit der Emission von einem und keinem Elektron wird deutlich, dass ein zusätzlicher Prozess existieren muß. Dieser wird der Anregung zweier benachbarter Elektronen und einer folgenden Auger-Abregung zugeschrieben. In Computersimulationen, basierend auf Streuquerschnitten für die Streuung von Elektronen an Neon- und Argonatomen, wird eine derartige Elektronenemission untersucht. Durch analoge Simulationen werden die Unterschiede im Energieverlust und der Elektronenausbeute bei der Streuung von Helium-, Neon- und Argonatomen auf einem quantitativen Niveau erklärt.

Im letzten Abschnitt wurde eine Erklärung für die Unterschiede in der kinetischen Elektronenemission bei planarem und axialem Oberflächen-Channeling gegeben. Der Anstieg in den Elektronenausbeuten für Projektile, die entlang einer niedrig indizierten azimutalen Kristallrichtung gestreut werden, beruht auf dem Eindringen von Projektilen in den Festkörper. Dabei wird die kinetische Energie dieser Projektile in Anregungen im Festkörper umgesetzt, was zu einer deutlichen Erhöhung der Elektronenausbeute führt. Durch einen Vergleich von koinzidenten und nicht koinzidenten Elektronenzahlspektren konnte eine frühere Erklärung durch unterschiedliche Trajektorien für die beiden Regimes nicht bestätigt werden.

Literaturverzeichnis

- [1] C. Rau, J. Magn. Mater. **30**, 141 (1982).
- [2] H. Winter, H. Hagedorn, R. Zimny, H. Nienhaus, and J. Kirschner, Phys. Rev. Lett. **62**, 296 (1989).
- [3] R. Pfandzelter, M. Ostwald, and H. Winter, Phys. Rev. B **63**, 140406(R) (2001).
- [4] J. Los and J. Geerlings, Phys. Rep. **190**, 133 (1990).
- [5] H. Winter, Comm. At. Mol. Phys. **26**, 287 (1991).
- [6] J. Burgdörfer, *Review of Fundamental Processes and Applications of Atoms and Ions* (Singapore: C.D. Lin, World Scientific, 1993).
- [7] F. Stölzle and R. Pfandzelter, Phys. Rev. A **150**, 315 (1990).
- [8] H. Winter and M. Sommer, Phys. Lett. **A168**, 409 (1992).
- [9] J. V. Wulik and J. Los, Phys. Scripta **T6**, 27 (1983).
- [10] F. Wyputta, R. Zimny, and H. Winter, Nucl. Instr. Meth. B **58**, 379 (1991).
- [11] C. Auth, A. Borisov, and H. Winter, Phys. Rev. Lett. **75**, 2292 (1995).
- [12] R. Pfandzelter, T. Igel, and H. Winter, Phys. Rev. B **54**, 4496 (1996).
- [13] R. Pfandzelter, T. Igel, and H. Winter, Surf. Sci. **375**, 13 (1997).
- [14] K. Kimura, M. Hasegawa, and M. Mannami, Phys. Rev. B **36**, 7 (1987).
- [15] A. Närmann, K. Schmidt, C. Höfner, W. Heiland, and A. Arnau, Nucl. Instr. Meth. B **78**, 72 (1993).
- [16] H. Winter, J. Remillieux, and J. Poizat, Nucl. Instr. Meth. B **48**, 382 (1990).
- [17] H. Breiten, H. Müller, A. Niehaus, and V. Kempter, Surf. Sci. **278**, 183 (1992).
- [18] A. Hegmann, R. Zimny, H. Ortjohann, H. Winter, and Z. Miskovic, Europhys. Lett. **26**, 383 (1994).

- [19] H. Winter, J. Phys.: Condens. Mat. **5**, 295 (1993).
- [20] C. Auth, T. Hecht, T. Igel, and H. Winter, Phys. Rev. Lett. **74**, 5244 (1995).
- [21] H. Niehus, W. Heiland, and E. Taglauer, Surf. Sci. Rep. **17**, 213 (1993).
- [22] P. Roncin, P. Villette, and J. Atanas, Phys. Rev. Lett. **83**, 864 (1999).
- [23] S. Lederer, Diplomarbeit, Humboldt-Universität zu Berlin (2001).
- [24] H. Winter, A. M. S. Lederer, C. Auth, F. Aumayr, and H. Winter, Nucl. Instrum. Meth. B **212**, 45 (2003).
- [25] J. Ziegler, J. Biersack, and U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids* (Pregamon Press, New York, 1985).
- [26] G. Moliere, Z. Naturforsch. **A 2**, 133 (1947).
- [27] O. Firsov, JETP **7**, 133 (1958).
- [28] D. O'Connor and J. Biersack, Nucl. Instr. Meth. **15**, 14 (1986).
- [29] H. Winter, Phys. Rep. **367**, 387 (2002).
- [30] A. Schüller, Diplomarbeit, Humboldt-Universität zu Berlin (2004).
- [31] A. Schüller, G. Adamov, S. Wethekam, K. Maass, A. Mertens, and H. Winter, Phys. Rev. A **69**, 050901(R) (2004).
- [32] A. Tenner, K. Gillen, T. Horn, J. Los, and A. Kleyn, Phys. Rev. Lett. **52**, 2183 (1984).
- [33] R. Lahaye, A. Kleyn, S. Stolte, and S. Holloway, Surf. Sci. **338**, 169 (1995).
- [34] K. Jacobson, in *Springer Proceedings in Physics*, edited by R. Nieminen, M. Puska, and M. Manninen (Springer Verlag Berlin, Heidelberg, 1990), vol. 48, p. 34.
- [35] M. Psuka, in *Springer Proceedings in Physics*, edited by R. Nieminen, M. Puska, and M. Manninen (Springer Verlag Berlin, Heidelberg, 1990), vol. 48, p. 134.
- [36] J. Smith, Phys. Rev. **181**, 522 (1969).
- [37] N. Jean, M. Trioni, G. Brivo, and V. Bortolani, Phys. Rev. Lett. **92**, 013201 (2004).
- [38] F. Aumayr, *persönliche Mitteilung*.
- [39] F. Aumayr, G. Laktis, and H. Winter, Applied Surface Science **47**, 139 (1991).

- [40] H. Drescher, L. Reimer, and H. Seidel, Z. Angew. Phys. **29**, 331 (1970).
- [41] H. Eder, Dissertation, Technische Universität Wien (2000).
- [42] R. Pfandzelter, Phys. Rev. B **57**, 15496 (1998).
- [43] R. Keyling, Dissertation, Freie Universität Berlin (2001).
- [44] H. Levinson, F. Greuter, and E. Plummer, Phys. Rev. B **27**, 727 (1983).
- [45] S. Hulbert, P. Johnson, N. Stoffel, W. Royer, and N. Smith, Phys. Rev. B **31**, 6815 (1985).
- [46] I. Tamm, Z. Phys. **76**, 849 (1932).
- [47] W. Shockley, Physical Review **56**, 317 (1939).
- [48] H. Winter, C. Auth, A. M. A. Kirtse, and M. Steiner, Europhys. Lett. **41**, 437 (1998).
- [49] C. Auth, A. Mertens, and H. Winter, Nucl. Instrum. Meth. B **135**, 302 (1998).
- [50] A. Mertens, K. Maass, S. Lederer, H. Winter, H. Eder, J. Stöckl, H. Winter, F. Aumayr, J. Viefhaus, and U. Becker, Nucl. Instrum. Meth. B **182**, 23 (2001).
- [51] D. Blauth, Diplomarbeit, Humboldt-Universität zu Berlin (2003).
- [52] R. Baragiola, E. Alonso, and A. Oliva-Florio, Phys. Rev. B **19**, 121 (1979).
- [53] S. Lederer, K. Maass, D. Blauth, H. Winter, H. Winter, and F. Aumayr, Phys. Rev. B **67**, 121405(R) (2003).
- [54] H. Winter and H. Winter, Europhys. Lett. **62**, 739 (2003).
- [55] H. Puff, Phys. Stat. Sol. **38**, 125 (1964).
- [56] N. Mott and H. Massey, *The Theory of Atomic Collisions* (Oxford University Press, London/New York, 1965).
- [57] B. Plenkiewicz, P. Plenkiewicz, and J. Jay-Gerin, Phys. Rev. A **38**, 4460 (1988).
- [58] A. Dasgupta and A. Bathia, Phys. Rev. A **32**, 3335 (1985).
- [59] J. Riviere, in *Solid State Surface Science*, edited by M. Dekker (Plenum Press, New York, 1969), vol. 1, p. 198.
- [60] H. Winter, *persönliche Mitteilung*.

- [61] J. Lörincik, Z. Sroubek, H. Eder, F. Aumayr, and H. Winter, Phys. Rev. B **62**, 16116 (2000).
- [62] Y. Matulevich, S. Lederer, and H. Winter, Phys. Rev. B **71**, 033405 (2005).
- [63] A. Kienja and K. Wojciechowski, *Metal surface electron physics* (Elsevier, Oxford, 1996).
- [64] A. Kiejna, Phys. Rev. B **43**, 14695 (1991).
- [65] N. Lang and W. Kohn, Phys. Rev. B **7**, 3541 (1973).
- [66] Z. Zhang, D. Lengreth, and J. Perdew, Phys. Rev. B **41**, 5674 (1990).
- [67] A. Eguiluz and W. Hanke, Phys. Rev. B **39**, 10433 (1989).
- [68] I. White, R. Godby, M. Rieger, and R. Needs, Phys. Rev. Lett. **80**, 4265 (1998).
- [69] R. Jones and P. Jennings, Surf. Sci. Rep. **9**, 165 (1988).
- [70] P. Jennings, R. Jones, and M. Weinert, Phys. Rev. B **37**, 6113 (1988).
- [71] R. Jones, P. Jennings, and O. Jepsen, Phys. Rev. B **29**, 6474 (1984).
- [72] F. Xu, N. Mandarino, A. Oliva, P. Zoccali, M. Camarca, A. Bonanno, and R. Baragiola, Phys. Rev. A **50**, 4040 (1994).
- [73] J. Lörincik and Z. Sroubek, Nucl. Instrum. Meth. B **164-165**, 633 (2000).
- [74] J. Olsen, T. Andersen, M. Barat, C. Courbin-Gaussorgues, V. Sidis, J. Pommer, J. Agusti, N. Andersen, and A. Russek, Phys. Rev. A **19**, 1457 (1979).
- [75] G. Zampieri, F. Meier, and R. Baragiola, Phys. Rev. A **29**, 116 (1984).
- [76] S. Pepper and P. Aron, Surf. Sci. **169**, 14 (1986).
- [77] M. Desjonqueres and D. Spanjaard, *Concepts in Surface Physics*, 2nd ed. (Springer, New York, 1996).
- [78] O. Grizzi, M. Shi, H. Bu, J. Rabalais, and R. Baragiola, Phys. Rev. B **41**, 4789 (1990).
- [79] V. Esaulov, L. Guillemot, O. Grizzi, and E. Sanches, Phys. Rev. A **65**, 052901 (2002).
- [80] R. Morgensten, A. Niehaus, and G. Zimmermann, J. Phys. B **13**, 4811 (1980).
- [81] L. Guillemot, S. Lacombe, V. Esaulov, and I. Urazgildin, Surf. Sci. **334**, 224 (1995).

- [82] O. Grizzi, E. Sanches, J. Gayone, L. Guillemot, V. Esaulov, and R. Baragiola, *Surf. Sci.* **469**, 71 (2000).
- [83] R. Johnson, *Introduction to Atomic and Molecular Collisions* (Plenum Press, New York and London, 1982).
- [84] C. Metz, T. Tschentscher, P. Suortti, A. Kheifets, R. Lun, T. Sattler, J. Schneider, and F. Bell, *Phys. Rev. B* **59**, 10512 (1999).
- [85] A. Kheifets, M. Vos, and E. Weigold, *Z. Phys. Chem* **215**, 1323 (2001).
- [86] F. Bell, H. Böckl, M. Wu, and H. Betz, *J. Phys. B* **16**, 187 (1983).
- [87] H. Eder, W. Messerschmidt, H. Winter, and F. Aumayr, *J. Appl. Phys.* **87**, 8198 (2000).
- [88] A. Borisov, D. Teillet-Billy, and J. Gauyacq, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2842 (1992).
- [89] Z. Sroubek, *Phys. Rev. Lett.* **21**, 3209 (1997).
- [90] I. Campillo, V. Silkin, J. Pitarke, E. Chulkov, A. Rubio, and P. Echenique, *Phys. Rev. B* **61**, 13484 (2000).
- [91] P. Echenique, R. Berndt, E. Chulkov, T. Fauster, A. Goldmann, and U. Hofer, *Surf. Sci. Rep.* **52**, 219 (2004).
- [92] J. Wang, C. Reinhold, and J. Burgdörfer, *Phys. Rev. A* **44**, 7243 (1991).
- [93] S. Canney, M. Vos, A. Kheifets, N. Clisby, I. McCarthy, and E. Weigold, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 1931 (1997).
- [94] H. Winter, S. Lederer, H. Winter, C. Lemell, and J. Burgdörfer, *Phys. Rev. B* **72**, 161402(R) (2005).
- [95] C. Lemell, *persönliche Mitteilung*.
- [96] A. Dasgupta and A. Bathia, *Phys. Rev. A* **30**, 1241 (1984).
- [97] P. Hoeper, W. Franzen, and R. Gupta, *Phys. Rev.* **168**, 50 (1968).
- [98] M. T. Robinson and O. S. Oen, *Phys. Rev.* **132**, 2385 (1936).
- [99] J. A. Davis, *Phys. Scr.* **28**, 294 (1983).
- [100] D. Gemell, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 129 (1974).
- [101] H. Winter, *Dissertation, München* (1986).
- [102] M. Hasegawa, K. Kimura, Y. Fujii, M. Suzuki, and M. Mannami, *Nucl. Instrum. Meth. B* **33**, 334 (1988).

- [103] H. Winter, G. Dierkes, A. Hegmann, J. Leuker, H. Orthjohann, and R. Zimny, in *NATO ASI Series B: Physics*, edited by R. Baragiola (Plenum Press, New York, 1993), vol. 306, p. 253.
- [104] G. Andau, K. Nakajima, and K. Kimura, Nucl. Instrum. Meth. B **160**, 16 (2000).
- [105] R. Pfandzelter, T. Bernhard, and H. Winter, Phys. Rev. Lett **90**, 036102 (2003).
- [106] T. Bernhard, M. Baron, M. Gruyters, and H. Winter, Phys. Rev. Lett **95**, 087601 (2005).

Abbildungsverzeichnis

2.1	Trajektorien zur Demonstration der streifenden Streuung	5
2.2	Simulierte und experimentelle Regenbogenwinkel für die Streuung von Ne^0 an Cu(111) als Funktion der Senkrechterenergie; offene Quadrate: experimentelle Daten nach [30], Linien: Simulationen	8
2.3	Experimentelle Regenbogenwinkel nach [30] und simulierte Regenbogenwinkel auf Basis des angepaßten Potentials für das System He-Cu(111)	9
2.4	Von Jean et al. [37] berechnetes Potential und angepaßtes Potential für das System He-Cu(111) (Details siehe Text)	9
3.1	UHV-Streukammer	12
3.2	Feldstärken bei zeitlich verschiedenen Eintrittspunkten von Ionen in das Pulsplattenpaar und entsprechende Trajektorien	14
3.3	TOF-Spektren für 12 keV He^+ und He^0	16
3.4	Skizze Elektronendetektor	18
3.5	Pulshöhenspektrum des Elektronendetektors bei der Streuung von 12 keV He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in}=2, 2^\circ$	19
3.6	Korrigiertes Pulshöhenspektrum bei der Streuung von 12 keV He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in}=2, 2^\circ$; schwarze Quadrate: Originalspektrum, Linienplots: Berücksichtigung der Reflexionen, offene rote Quadrate: Gesamtanpassung	19
3.7	Elektronische Schaltung zur koinzidenten Erfassung von Projektflugzeiten und Elektronenzahlen	21
3.8	Energieverlust-Elektronenzahl-Spektrum bei der Streuung von 12 keV He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in}=2, 2^\circ$	22
3.9	Energieverlustspektren für 0, 1 und 2 Elektronen bei der Streuung von 12 keV He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in}=2, 2^\circ$	23
3.10	Nicht koinzidentes Elektronenzahlspektrum für die Streuung von 12 keV He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in}=2, 2^\circ$	23
4.1	Schematische Darstellung einer (110)-Oberfläche	25
4.2	Schematische Darstellung einer (111)-Oberfläche	25
4.3	Targetstromkurve beim Sputtern der Al(111)-Oberfläche mit 100 keV Ar^+ unter $\Phi_{in} = 2^\circ$	26
4.4	Streuverteilung bei der Streuung von 25 keV Ar^0 an Al(111)	27

4.5	Bandstruktur von Al(111)	28
4.6	Projizierte Bandstruktur von Al(110)	29
4.7	Projizierte Bandstruktur von Cu(111)	30
5.1	Energieverluste bei der Streuung von He^0 an Al(111) als Funktion der Projektilenergie für verschiedene Einfallswinkel Φ_{in}	32
5.2	Energieverluste bei der Streuung von He^0 an Cu(111) als Funktion der Projektilenergie für verschiedene Einfallswinkel Φ_{in}	33
5.3	Experimentelle Energieverluste als Funktion des Einfallswinkels und Anpassung durch Gleichung 5.5 bei der Streuung von 1,5 keV He^0 an Al(111)	34
5.4	Parameter der „stopping power“ bei der Streuung von He^0 an Al(111) und Cu(111)	36
5.5	$S(z,E)$ als Funktion der Projektilgeschwindigkeit im Abstand von $z = 2$ a.u. (Quadrate) und 3 a.u. (Kreise) bei der Streuung von He^0 an Al(111) (volle Symbole) und Cu(111) (offene Symbole)	37
5.6	Elektronenausbeute bei der Streuung von He^0 an Al(111) für verschiedene Einfallswinkel Φ_{in} als Funktion der Projektilenergie	38
5.7	Elektronenausbeute bei der Streuung von He^0 an Cu(111) für verschiedene Einfallswinkel Φ_{in} als Funktion der Projektilenergie	38
5.8	Elektronenausbeute als Funktion der Projektilenergie bei der Streuung von He^0 an Al(111) und Cu(111) für je zwei Einfallswinkel	39
5.9	Parameter der Elektronenproduktionsrate bei der Streuung von He^0 an Al(111) und Cu(111)	40
5.10	$P(z,E)$ als Funktion der Projektilgeschwindigkeit im Abstand von $z = 2$ a.u. (Quadrate) und 3 a.u. (Kreise) bei der Streuung von He^0 an Al(111) (volle Symbole) und Cu(111) (offene Symbole)	41
5.11	Prinzip der verschobenen Fermi-Kugel beim Elektron-Atom-Stoß	43
5.12	Flächenprojektion verschobener Fermi-Kugeln für $v_p = v_{th}$ und $v_p > v_{th}$	43
5.13	Skizze zum Austrittskegel von Elektronen	44
5.14	Flächenprojektion verschobener Fermi-Kugeln für $v_p > v_{th}$	45
5.15	Differentieller Streuquerschnitt und Energietransfer auf das Elektron bei der Streuung von Elektronen an Argon	47
5.16	Quadratwurzeln der Elektronenausbeuten an der Schwelle der kinetischen Elektronenemission bei der Streuung von He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 5,5^\circ$ (volle Quadrate) und $\Phi_{in} = 2,2^\circ$ (offene Kreise); Linien: beste Anpassung durch Gleichung 5.25	48
5.17	Quadratwurzeln der Elektronenausbeuten an der Schwelle der kinetischen Elektronenemission bei der Streuung von He^0 an Cu(111) unter $\Phi_{in} = 4,6^\circ$ (volle Quadrate) und $\Phi_{in} = 2,6^\circ$ (offene Kreise); Linien: beste Anpassung durch Gleichung 5.25	49
5.18	Verlauf der Elektronendichten für Al(111) und Cu(111) [60]	50

5.19	Normierte Energieverlustspektren für einzelne Elektronenzahlen und zusätzlicher Energieverlust als Funktion der Elektronenzahl bei der Streuung von 12 keV He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 2, 2^\circ$	51
5.20	Energieverlust pro Elektron bei der Streuung von He^0 an Al(111) und Cu(111) als Funktion der Projektilenergie für verschiedene Einfallswinkel Φ_{in}	53
5.21	Anteil der Elektronenemission am Energieverlust bei der Streuung von He^0 an Al(111) und Cu(111)	54
5.22	Schematischer Verlauf von Elektronenenergie und Oberflächenpotential vor Metalloberflächen	56
5.23	Maximale Elektronenimpulse für die Streuung von He^0 an Al(110), Al(111) und Cu(111) als Funktion des Abstandes zur Oberfläche	57
5.24	Effektives Oberflächenpotential der Elektronen als Funktion des Abstandes zur Oberfläche für Al(110), Al(111) und Cu(111)	58
6.1	Energieverlust als Funktion der Projektilenergie für verschiedene Einfallswinkel Φ_{in} bei der Streuung von Ne^0 an (a) Cu(111) und (b) Al(111)	62
6.2	Elektronenausbeute als Funktion der Projektilenergie für verschiedene Einfallswinkel Φ_{in} bei der Streuung von Ne^0 an (a) Cu(111) und (b) Al(111)	63
6.3	Energieverlustspektren, koinzident mit der Emission von keinem (Quadrate) und einem Elektron (offene Kreise), bei der Streuung von 16 keV Ne^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 2, 2^\circ$	64
6.4	Energieverlustspektren, koinzident mit der Emission von keinem (Quadrate) und einem Elektron (offene Kreise), bei der Streuung von 5 keV Ne^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 5, 5^\circ$	64
6.5	MO-Diagramm für das System Ne-Al [73]	65
6.6	Simulierte internukleare Anstände und nukleare Energieverluste bei der Streuung von 5 keV Ne^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 5, 5^\circ$; offene Symbole $b > 1, 2$ a.u., volle Symbole $b \leq 1, 2$ a.u.	66
6.7	Ladungsgetrenntes TOF-Spektrum bei der Streuung von 6 keV Ne^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 5, 5^\circ$; offene Symbole $\text{Ne}^0 \rightarrow \text{Ne}^+$, volle Symbole $\text{Ne}^0 \rightarrow \text{Ne}^0$	67
6.10	Theoretische Wahrscheinlichkeiten für Ein- und Zwei-Elektronen-Prozesse für Ne-Na Stöße in der Gasphase [74]	69
6.8	Energieverlustspektren für die Emission von keinem, einem und zwei Elektronen bei der Streuung von 5 keV Ne^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 5, 5^\circ$	69
6.9	Anteile der $2p^4$ - und $2p^5$ -Anregungen als Funktion der Projektilenergie bei der Streuung von Ne^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 5, 5^\circ$	70
6.11	Relative Anteile der Anregungen in $2p^4$ - und $2p^5$ -Konfigurationen als Funktion von z_{min} (a); relative Anteile der Anregungen, die zu Elektronenemission führen als Funktion von z_{min} (b)	72

6.12	Energieverlust als Funktion der Projektilgeschwindigkeit bei der Streuung von He^0 , Ne^0 und Ar^0 an $\text{Al}(111)$ unter $\Phi_{in} = 2, 2^\circ$	74
6.13	Quadratwurzeln der Elektronenausbeuten als Funktion der Projektilgeschwindigkeit bei der Streuung von He^0 , Ne^0 und Ar^0 an $\text{Al}(111)$ unter $\Phi_{in} = 2, 2^\circ$	75
6.14	Energiespektrum des direkten Strahls für 6 keV Ar^0	76
6.15	Energieverlustspektren für die Emission von keinem und einem Elektron bei der Streuung von (a) 3 keV Ne^0 und (b) 5 keV Ar^0 an $\text{Al}(111)$ unter $\Phi_{in} = 2, 2^\circ$	77
6.16	(a) ebene Welle und dazugehörige Impulsverteilung (b); Durch den Einfluß einer Potentialstufe geht (a) in (c) und (b) in (d) über.	78
6.17	Schema von Impulsverteilung und Rückstreuung	79
6.18	Differentielle Streuquerschnitte für die Streuung von Elektronen mit $E = 15$ eV an Argon und Neon als Funktion des Streuwinkels	80
6.19	Quadratwurzeln der experimentellen Elektronenausbeuten bei der Streuung von Ar^0 und Ne^0 an $\text{Al}(111)$ unter $\Phi_{in} = 2, 2^\circ$ mit Resultat der Simulation basierend auf dem Compton-Profil vor der Oberfläche	81
6.20	Energiebänder und Impulsdichteverteilungen entlang der $[100]$ -, der $[110]$ - und der $[111]$ -Richtung für Aluminium aus [93]	82
6.21	Quadratwurzeln der Elektronenausbeuten bei der Streuung von Ar^0 unter $\Phi_{in} = 2, 9^\circ$ an $\text{Al}(110)$ entlang der $\langle 100 \rangle$ -, der $\langle 110 \rangle$ -, der $\langle 111 \rangle$ - und einer Random-Richtung	83
6.22	Energieverlustspektren für die Emission von keinem und einem Elektron bei der Streuung von 4 keV Ar^0 an $\text{Al}(111)$ unter einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 2, 2^\circ$	84
6.23	(a) Energieverlustspektrum für Projektile koinzident mit der Emission von zwei Elektronen bei der Streuung von 4 keV Ar^0 an $\text{Al}(111)$ unter $\Phi_{in} = 2, 2^\circ$; (b) Abbildung 6.22 jedoch mit korrigiertem Spektrum für die Emission eines Elektrons	85
6.24	Schematische Darstellung der Wechselwirkung eines Projektils mit: (a) einem Elektron (1) Energieverlust (2) Energieverlust und Elektronenemission; (b) zwei Elektronen (1) Energieverlust (2) Auger-Abregung der Elektronen mit Elektronenemission	87
6.25	Differentieller Streuquerschnitt, der Energieübertrag auf das Elektron und die Gesamtenergie des Elektrons als Funktion des Streuwinkels für die Systeme (a) $\text{Ne}^0 - e^-$, $k = 0,8$ a.u. und (b) $\text{Ar}^0 - e^-$, $k = 0,84$ a.u.	89
6.26	Simulierte Energieverlustspektren für die Emission von keinem und einem Elektron bei der Streuung von (a) 3 keV Ne^0 und (b) 5 keV Ar^0 an $\text{Al}(111)$	90
6.27	Differentieller Streuquerschnitt, Energieübertrag auf das Elektron und die Gesamtenergie des Elektrons als Funktion des Streuwinkels (a) und simulierte Spektren für die Emission von keinem und einem Elektron (b) bei der Streuung von 4 keV Ar^0 unter $\Phi_{in} = 2, 2^\circ$	92

6.28	Energieverlustspektren für die Emission von keinem und einem Elektron bei der Streuung von 2 keV Ar ⁰ an Al(111) unter einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 2, 2^\circ$	93
6.29	Differentieller Streuquerschnitt, Energieübertrag auf das Elektron und Gesamtenergie des Elektrons als Funktion des Streuwinkels (a) und simulierte Spektren für die Emission von keinem und einem Elektron (b) bei der Streuung von 2 keV Ar ⁰ unter $\Phi_{in} = 2, 2^\circ$. . .	94
6.30	Simulierte nukleare Energieverlustspektren bei der Streuung von 1,25 keV He ⁰ , 6 keV Ne ⁰ und 12 keV Ar ⁰ an Al(111) unter einem Einfallswinkel von $\Phi_{in} = 2, 2^\circ$	96
6.31	Differentieller Streuquerschnitt, der Energieübertrag auf das Elektron und die Gesamtenergie des Elektrons als Funktion des Streuwinkels für die Streuung von (a) 1,25 keV He ⁰ , (b) 6 keV Ne ⁰ und (c) 12 keV Ar ⁰	97
6.32	Simulierte und experimentelle Energieverlustspektren zusammen mit den Verteilungen des nuklearen Energieverlustes und der Faltung für Ereignisse ohne Elektronenemission bei der Streuung von (a) 1,25 keV He ⁰ , (b) 6 keV Ne ⁰ und (c) 12 keV Ar ⁰	98
6.33	Simulierte Energieverlustspektren für die Emission von keinem und einem Elektron bei der Streuung von $v = 0, 11$ a.u. He ⁰ , Ne ⁰ und Ar ⁰ an Al(111) unter $\Phi_{in} = 2, 2^\circ$	99
6.34	Quadratwurzeln der Elektronenausbeuten bei der Streuung von He ⁰ , Ne ⁰ und Ar ⁰ an Cu(111) unter $\Phi_{in} = 4, 6^\circ$	100
7.1	Targetstromkurve bei der Streuung von 16 keV He ⁺ an Al(111) unter $\Phi_{in} = 1, 9^\circ$	102
7.2	Koinzidente Elektronenzahlspektren bei der Streuung von 16 keV He ⁰ an Al(111) unter $\Phi_{in} = 1, 9^\circ$ für Random-Streuung und die $\langle 110 \rangle$ -Richtung	103
7.3	Energieverlustspektren bei der Streuung von 16 keV He ⁰ an Al(111) unter $\Phi_{in} = 1, 9^\circ$ für Random-Streuung und die $\langle 110 \rangle$ -Richtung . . .	104
7.4	Nicht koinzidente Elektronenzahlspektren bei der Streuung von 16 keV He ⁰ an Al(111) unter $\Phi_{in} = 1, 9^\circ$ für Random-Streuung und die $\langle 110 \rangle$ -Richtung	105
7.5	Koinzidente und Summe aus koinzidenten und nicht koinzidenten Elektronenausbeuten zusammen mit Targetstrom als Funktion des azimuthalen Einfallswinkels bei der Streuung von 16 keV He ⁰ an Al(111) unter $\Phi_{in} = 1, 9^\circ$	106
7.6	Differenz der nicht koinzidenten Elektronenausbeuten bei der Streuung von He ⁰ an Al(111) und Cu(111) für die $\langle 110 \rangle$ -Richtung und planares Oberflächen-Channeling	107
7.7	Nicht koinzidente Elektronenzahlspektren bei der Streuung von 2 keV He ⁰ an Al(111) unter $\Phi_{in} = 4, 4^\circ$; blau: Random-Richtung, rot: $\langle 110 \rangle$ -Richtung	108

7.8	Energieverlustspektren bei der Streuung von 2 keV He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 4,4^\circ$ für eine Random- und die $\langle 110 \rangle$ -Richtung	109
7.9	Nicht koinzidente Elektronenzahlspektren bei der Streuung von 18 keV Ne^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 3,3^\circ$; blau: Random-Richtung, rot: $\langle 110 \rangle$ -Richtung	110
7.10	Differenz der nicht koinzidenten Elektronenausbeuten bei der Streuung von Ne^0 und He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 3,3^\circ$ für die $\langle 110 \rangle$ -Richtung und planares Oberflächen-Channeling	110
7.11	Normierte Zählraten des Elektronendetektors bei der Streuung von 16 keV He^0 an Al(111) unter $\Phi_{in} = 1,9^\circ$ bei Dirsdiscriminatorschwellen von (a) 4,0 ; (b) 0,8 und (c) 0,15; die Abbildungen (a1), (b1) und (c1) zeigen Anhand des nicht koinzidenten Elektronenzahlspektrums für die $\langle 110 \rangle$ -Richtung die durch den jeweiligen Diskriminator erfaßten Elektronenzahlen (grauer Bereich)	112

Aktuelles Publikationsverzeichnis

- A. Mertens, K. Maass, S. Lederer, H. Winter, H. Eder, J. Stöckl, H.P. Winter, F. Aumayr, J. Viefhaus, and U. Becker
Studies on electron emission during grazing impact of keV-hydrogen atoms on a LiF(001) surface via translational spectroscopy
Nucl. Instrum. Meth. B 182 (2001), S. 23
- A. Mertens, S. Lederer, K. Maass, H. Winter, J. Stöckl, H.P. Winter, and F. Aumayr
Excitation vs. electron emission near their kinetic thresholds for grazing impact of hydrogen atoms on LiF(001)
Phys. Ref. B 65 (2002), S. 132410
- J. Stöckl, H.P. Winter, F. Aumayr, S. Lederer, A. Mertens, K. Maass, and H. Winter
Formation of surface excitons and electron emission during grazing impact of hydrogen atoms on LiF(001)
Nucl. Instrum. Meth. B 193 (2002), S. 645
- H. Winter, S. Lederer, K. Maass, A. Mertens, F. Aumayr, and HP. Winter
Statistics of electron and exciton production for grazing impact of keV hydrogen atoms on a LiF(001) surface
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 35 (2002), S. 3315
- S. Lederer, A. Mertens, H. Winter, F. Aumayr, HP. Winter, and V. Staemmler
Electronic processes near kinematic threshold for grazing scattering of fast hydrogen atoms from a LiF(001) surface
Nucl. Instrum. Meth. B 203 (2003), S. 23
- H. Winter, A. Mertens, S. Lederer, C. Auth, F. Aumayr, and HP. Winter
Electronic processes during impact of fast hydrogen atoms on a LiF(001) surface
Nucl. Instrum. Meth. B 212 (2003), S. 45

- S. Lederer, K. Maass, D. Blauth, H. Winter, HP. Winter, and F. Aumayr
Kinetic electron emission from the selvage of a free-electron-gas metal
Phys. Rev. B 67 (2003), S. 121405(R)
- H. Winter, K. Maass, S. Lederer, HP. Winter, and F. Aumayr
Kinetic electron emission for planar versus axial surface channeling of He atoms and ions
Phys. Rev. B 69 (2004), S. 054110
- H. Winter, and S. Lederer
Electron emission from solids: How do fast atomic projectiles extract electrons from solids?
Humboldt Spektrum 3-4 (2004), S. 38
- Y. Matulevich, S. Lederer, and H. Winter
Near-threshold emission of electrons during grazing scattering of keV Ne atoms from an Al(111) surface
Phys. Rev. B 71 (2005), S. 033405
- HP. Winter, S. Lederer, H. Winter, C. Lemell, and J. Burgdörfer
Kinetic electron emission induced by grazing scattering of slow atoms: Local probe of the Compton Profile near the Fermi edge
Phys. Rev. B 72 (2005), S. 161402(R)
- S. Lederer, H. Winter, and HP. Winter
Electron emission for grazing impact of keV He atoms on an Al(111) surface
Nucl. Instr. Meth. B 232 (2005), S. 47
- HP. Winter, S. Lederer, F. Aumayr, and H. Winter
Electron emission for grazing slow atom and ion impact on monocrystalline metal and insulator surfaces
Physica Scripta 72 (2005) C12
- S. Lederer, and H. Winter
Energy loss of 100-keV hydrogen atoms during grazing scattering from Cu(111)
Phys. Rev. A 73 (2006), S. 054901
- H. Winter, S. Lederer, and HP. Winter
Fermi momentum above metal surface from electrons ejected by He atoms
zur Veröffentlichung in Europhysics Letters angenommen

- S. Lederer, H. Winter, HP. Winter, and F. Aumayr
Electronic excitations during grazing scattering of hydrogen atoms on KI(001) and LiF(001) surfaces
zur Veröffentlichung in Europhys. J. eingereicht

Konferenzbeiträge

- S. Lederer, A. Mertens, K. Maass, H. Winter, J. Stöckl, H.P. Winter und F. Aumayr
Coincident projectile energy loss and electron emission in grazing collisions of fast hydrogen atoms from a LiF(001) surface
Vortrag auf der ECAMP VII, Berlin, April 2001

Selbständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, die vorliegende Arbeit selbständig ohne fremde Hilfe verfaßt und nur die angegebene Literatur und Hilfsmittel verwendet zu haben.

Berlin, den 12.04.2006

.....
Sven Lederer